VISIT…

LANZAROTE Caliente.COM

К 100-летию
со дня рождения



W. Heisenberg

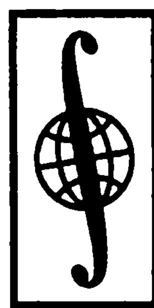
КЛАССИКИ
н а у к и

В. ГЕЙЗЕНБЕРГ



ИЗБРАННЫЕ ТРУДЫ

Перевод с немецкого
Ю.А.Данилова и А.А.Сазыкина



УРСС
Москва ♦ 2001

ББК 22.1, 22.314



Настоящее издание осуществлено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 98-02-30033)

Серия «Классики науки»

Гейзенберг Вернер

Избранные труды. Пер. с нем. Ю. А. Данилова и А. А. Сазыкина. — М.: Эдиториал УРСС, 2001. — 616 с.

ISBN 5-8360-0210-X

Вниманию читателей предлагается собрание избранных научных трудов выдающегося физика-теоретика, одного из создателей новой физики Вернера Гейзенберга (1901–1976). В настоящее издание включены работы по квантовой механике, квантовой теории поля, теории ферромагнетизма, теории турбулентности, теории ядра и теории космических ливней.

Группа подготовки издания:

Директор — Доминго Марин Рикой
Заместители директора — Наталья Финогенова, Ирина Макеева
Администратор — Леонид Иосилевич
Компьютерный дизайн — Виктор Романов
Верстка — Михаил Кириллов, Василий Подобед
Редакционно-корректурные работы — Елена Кудряшова, Андрей Стулов
Обработка графики — Наталья Аринчева
Набор — Анна Тюрина
Техническая поддержка — Анна Чикунова
Менеджер по продажам — Алексей Петяев

Издательство «Эдиториал УРСС». 113208, г. Москва, ул. Чертановская, д. 2/11, к. п.
Лицензия ИД № 03216 от 10.11.2000 г. Гигиенический сертификат на выпуск книжной продукции № 77.ФЦ.8.953.П.270.3.99 от 30.03.99 г. Подписано к печати 16.12.2000 г.
Формат 70×100/16. Тираж 1200 экз. Печ. л. 38,5. Зак. № 6

Отпечатано в ГУП «Облиздат». 248640, г. Калуга, пл. Старый Торг, 5.



ISBN 5-8360-0210-X

© Эдиториал УРСС, 2001

Все права защищены. Никакая часть настоящей книги не может быть воспроизведена или передана в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, будь то электронные или механические, включая фотокопирование и запись на магнитный носитель, если на то нет письменного разрешения Издательства.

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемое вниманию читателей собрание избранных научных трудов выдающегося физика-теоретика, одного из создателей новой физики Вернера Гейзенберга (1901–1976) с запозданием завершает многолетнюю работу по собиранию, отбору, переводу и редактированию его трудов. Гидродинамическая устойчивость и турбулентность, строение атома и молекул, квантовая механика и ее приложения, квантовая теория поля, теория дырок Дирака, космические лучи, матрица рассеяния, ферромагнетизм и попытка создания нелинейной единой теории поля — таков далеко не полный перечень научных проблем, в постановку и — во многих случаях — решение которых Гейзенберг внес решающий вклад. Его физическая интуиция и научная дерзость поражали даже тех, кто в разные периоды его жизни работали с ним.

Гейзенбергу, более полувека принимавшему активное участие в создании новой физики, принадлежат и многочисленные попытки ее философского осмысления. Из под его пера вышли такие замечательные книги, как «Физика и философия», «Революция в современной физике», «Физика и за ее пределами: встречи и беседы», «Традиция в науке», и духовная автобиография «Часть и целое».

В настоящее издание включены работы Гейзенберга по квантовой механике, квантовой теории поля, теории феррмагнетизма, теории турбулентности, теории ядра и теории космических ливней. Несмотря на заведомую неполноту, они позволяют составить представление о масштабах научной деятельности выдающегося теоретика.

При составлении плана издания и отборе работ мы пользовались бесценными советами проф. Я. А. Смородинского (1917–1991), с которым нас связывала многолетняя совместная работа, издательская деятельность (в частности (но не только) публикация в серии «Классики науки» четырехтомного издания научных трудов Альберта Энштейна и двухтомника Вольфгана Паули) и личная дружба. Предполагалось, что он возьмет на себя обязанности научного редактора. Его безвременная кончина нарушила эти планы. Мы больше, чем кто-либо другой, сознаем невосполнимость этой утраты.

Издание трудов Вернера Гейзенберга не могло бы быть осуществлено без плодотворного сотрудничества с коллективом издательства «Эдиториал УРСС», которое также взяло на себя финансирование перевода. Выражаем ему нашу искреннюю признательность. Также благодарим РФФИ за финансовую поддержку издания.

Ю. А. Данилов, А. А. Сазыкин

Часть I

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

К КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ СТРУКТУРЫ ЛИНИЙ И АНОМАЛЬНОГО ЭФФЕКТА ЗЕЕМАНА*

Высокая регулярность и закономерный характер картины расщепления линий при аномальном эффекте Зеемана в последнее время неоднократно становились предметом подробного рассмотрения. Первым, кто выяснил единую структуру зеемановского расщепления, был Бак[1)], которому мы особенно обязаны эмпирическими данными. Затем Ланде[2)], развивая квантовотеоретическую точку зрения, почерпнутую им из «магнитооптической теоремы о расщеплении» Зоммерфельда[3)], и используя приведенные в той же работе «внутренние квантовые числа», вывел простые квантовотеоретические формулы для магнитного расщепления в слабых полях, оказавшиеся в хорошем согласии с экспериментом и при экстраполяции. Во второй части своей работы[4)] Ланде предпринял попытку обосновать выведенные им формулы на основе некоторых модельных соображений. Несколько позднее Пашен и Бак[5)] открыли замечательные магнитные свойства дуплетов и триплетов, которые, по-видимому, тесно связаны с рассматриваемой проблемой. Дальнейшее упорядочение эмпирических данных будет достигнуто лишь в том случае, если теорию D-линий Фойгта и упрощения, внесенные в нее Зоммерфельдом[6)], удастся перевести на язык квантовой теории. В случае дуплетов это позволило бы нам подробно проследить весь переход от слабых магнитных ролей (аномального эффекта Зеемана) к эффекту Пашена—Бака. Теория всех этих эффектов должна удовлетворять следующим требованиям: 1) качественно и количественно (насколько это возможно без обращения к деталям модели) воспроизводить все элементы структуры линий; 2) описывать все накопленные к настоящему времени эмпирические данные по аномальному эффекту Зеемана и переход к эффекту Пашена—Бака. Прежде чем приступить к изложению теории, рассмотрим кратко имеющиеся эмпирические данные. Тем, кто интересуется их обоснованием и проверкой, рекомендуем обратиться к названным выше работам и к выходящему из печати новому изданию книги[7)] Зоммерфельда.

---

* Zur Quantentheorie der Linienstructur und der anomalen Zeemaneffekte. — Zs. Phys., 1922, **8**, H. 4, 273–297. *Перевод Ю. А. Данилова.*

1) *Back E.* Naturwiss., 1921, **9**, 199.

2) *Landè A.* Zs. Phys., 1921, **5**, 231.

3) *Sommerfeld A.* Ann. d. Phys., 1920, **63**, 221.

4) *Landè A.* Zs. Phys., 1921, **7**, 398.

5) *Paschen F., Back E.* Zeemanjubiläumsheft. Physica, 1921, **1**, 261.

6) *Sommerfeld A.* Göttingen Nachr., 1914, März; Zs. Phys., 1922, **8**, 257–272.

7) *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl. Braunschweig, 1922. Kap. 6. — Русский перевод: *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. Т. 1, 2. М.: Гостехиздат, 1956.

I
СТРУКТУРА ДУБЛЕТА

Если $\Delta\nu_n$ — нормальное магнитное расщепление, задаваемое соотношением $\Delta\nu_n = \frac{1}{4\pi}\frac{e}{mc}H$, $\Delta\nu$ — первоначальное расстояние между линиями дублета (т.е. $\Delta\nu h$ — разность энергий дублетных термов), и, наконец, v — отношение $v = \frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_n}$, то, согласно Ланде, при $v \sim \infty$ приращение энергии в магнитном поле уровня с азимутальным квантовым числом n и «внутренним» квантовым числом n_J [8]) определяется соотношением

$$\Delta E = \frac{n_J m^*}{n - \frac{1}{2}} \Delta\nu_n h, \tag{1}$$

где m^* — магнитное квантовое число, принимающее значения $\left(\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \ldots\right)$ [9]) и удовлетворяющее дополнительному условию $|m^*| < n_J$. Формулу (1) можно преобразовать к виду

$$\Delta E = m^* \left(1 \pm \frac{1}{2n-1}\right) \Delta\nu_n h, \tag{2}$$

где верхний знак относится к верхнему уровню дублета ($n_J = n$), а нижний — к нижнему ($n_J = n - 1$). Экстраполяция гораздо более общей теории Фойгта [10]) позволяет утверждать следующее: если $\bar{E}$ — полусумма энергий дублетных термов, то полная энергия определяется соотношением

$$E = \bar{E} + \Delta\nu_n h \left[m^* \pm \frac{1}{2}\sqrt{v^2 + 2\frac{m^*}{n^*}v + 1} \right]. \tag{3}$$

Эта формула содержит в себе формулы (1) и (2). Действительно, в слабых полях отношение v очень велико, в силу чего при разложении по степеням $1/v$ мы получаем

$$E = \bar{E} + \Delta\nu_n h \left[m^* \pm \frac{v}{2}\left(1 + \frac{m^*}{n^*}\frac{1}{v}\right)\right] = \bar{E} \pm \frac{\Delta\nu}{2}h + \Delta\nu_n h m^* \left(1 \pm \frac{1}{2n-1}\right).$$

В сильных полях (т.е. при $\nu \sim 0$) из формулы (3) следует эффект Пашена—Бака:

$$E = \bar{E} + \Delta\nu_n h\left(m^* \pm \frac{1}{2}\right),$$

где $m^* \pm \frac{1}{2}$ — целое число. Таким образом, формула (3) описывает все эмпирические данные по дублетам.

---

8) Зоммерфельд обозначает это квантовое число n_i. Мы изменим обозначение на n_J, чтобы подчеркнуть, что в случае дублета, как будет показано в дальнейшем и как предполагал еще Ланде, n_J представляет собой не что иное, как квантовое число полного момента импульса атома. В случае триплета зависимость между n_J и полным моментом импульса носит более сложный характер.

9) Звездочка * указывает на «полуцелые» значения, принимаемые квантовым числом $m^* = m - \frac{1}{2}$. Обозначение $n^* = n - \frac{1}{2}$ выбрано из аналогичных соображений.

10) Совпадение ее с экспериментом для линии $\lambda = 6\,708$ Å лития было показано Кентом (*Kent* Astrophys. Journ., 1914, **40**, 343).

II
СТРУКТУРА ТРИПЛЕТА

В этом случае, согласно Ланде, для слабых полей приращение энергии в магнитном поле задается формулами

$$\begin{aligned} \Delta E &= m\left(1+\frac{1}{n}\right)\Delta\nu_n h && \text{при} \quad n_J = n, \\ \Delta E &= m\left(1-\frac{1}{n}+\frac{1}{n-1}\right)\Delta\nu_n h && \text{при} \quad n_J = n-1, \\ \Delta E &= m\left(1-\frac{1}{n-1}\right)\Delta\nu_n h && \text{при} \quad n_J = n-2. \end{aligned} \tag{4}$$

На этот раз магнитное квантовое число m должно быть целым числом, удовлетворяющим дополнительному условию

$$|m| \leqslant n_J.$$

Для сильных полей мы и в случае триплета получаем эффект Пашена—Бака. Аналога теории D-линий Фойгта для перехода от слабых полей к сильным полям для триплета не существует.

Уложив все имеющиеся к настоящему времени измерения и наблюдения в простую квантовомеханическую схему, приступим к рассмотрению вопроса об их интерпретации на основе модельных соображений.

§ 1
Общие соображения относительно дублетных атомов

В периодической системе элементов для структуры линий чрезвычайно характерно следующее свойство: дублетная структура всегда связана с нечетной, а триплетная — с четной валентностью. Это утверждение было высказано еще Ридбергом[11], и более строго обосновано Зоммерфельдом[12]. Простейшая интерпретация этого факта заключалась бы в принятии гипотезы о том, что в случае дублета за счет более слабой связи особую роль играет *один* внешний электрон, а в случае триплета — *два* внешних электрона.

Таким образом, «дублетный атом» (например, атом щелочного металла) допускает следующее описание.

Он состоит из системы сгруппированных вокруг ядра сильно связанных электронов, которую мы условимся в дальнейшем называть атомным остовом, и внешнего электрона, называемого также «электроном серии», или «валентным электроном». В нормальном состоянии, соответствующем терму $1s$, весь атом обладает моментом импульса $1\cdot(h/2\pi)$. Для упрощения формул мы будем в дальнейшем опускать множитель $h/2\pi$ и говорить, что в нормальном состоянии весь атом обладает моментом импульса 1. Это соответствует предположению, обычно принимаемому относительно s-терма. Возникает вопрос: что можно утверждать относительно момента импульса внешних электронов? Прежде всего, ясно, что момент импульса внешних электронов никак не может быть постоянным: в процессе движения момент импульса будет многократно передаваться от остову электрону и наоборот. Примем теперь

[11] *Rydberg A.* Astrophys Journ., 1897, 6, 239.

[12] *Sommerfeld A.* Ann. d. Phys., 1920, **63**, 221; см. также в книге: Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl. Braunschweig, 1922. Kap. 6, § 6.

предположение, имеющее фундаментальное значение для последующего изложения: будем считать, что в среднем по времени момент импульса равнораспределен между остовом и внешним электроном, т. е. что средний момент импульса как остова, так и электрона, равен 1/2. Это предположение эквивалентно следующему: внешний электрон проквантован по моменту импульса так же, как (релятивистский) атом водорода, но с квантовым числом 1/2. Чтобы наше предположение в последней форме вывести из его первоначальной формы, заметим следующее.

Для описания стационарных орбит внешних электронов необходимо воспользоваться угловой переменной[13], которую, как следует из свойств сериальных спектров, надлежит вводить так же, как в случае атома водорода. Первое условие квантования устанавливает, как известно, общий вид серий

$$E = -\frac{R \cdot h}{m^2},$$

где R — постоянная Ридберга, а m — общее квантовое число, входящее в серии. Разумеется, что m не имеет ничего общего с магнитным квантовым числом, о котором мы упоминали во введении.

Второе квантовое условие (именно оно и представляет для нас особый интерес) ведает появлением серии Бальмера в различных (s-, p-, d- и т. д.) сериях. Оно гласит:

$$\int_0^{2\pi} p\, d\beta = n^* h.$$

Здесь p означает момент импульса электрона, β — сопряженную угловую переменную, а именно: угол, образуемый большой осью орбиты с одной из координатных осей (в полярных координатах — с направлением $\varphi = 0$), n^* — квантовое число момента импульса внешнего электрона. В левой части равенства, очевидно, стоит умноженное на 2π среднее по времени от p, вычисленное за полный период обращения перигелия. Поскольку за один период электрон успевает совершить очень большое число оборотов по своей орбите, то среднее значение момента импульса p с достаточно хорошим приближением можно считать не отличающимся от введенного выше и равного 1/2.

Итак, из $\bar{p} = 1/2$ следует, что $n^* = 1/2$ для основной орбиты $1s$, а также для любой орбиты ms.

Предположим теперь, что атомный остов сохраняет свой средний момент импульса 1/2 и в возбужденном состоянии. Напомним, что для внешнего электрона квантовое число m, входящее в формулу серий, всегда целое и его можно рассматривать как сумму квантового числа момента импульса и радиального квантового числа. Отсюда следует, что радиальное квантовое число полуцелое, т. е. принимает значения $(1/2, 3/2, \ldots)$, и что его минимальное значение равно не 0, а 1/2[14]. Это означает, что если описанный выше ход изменения радиального квантового числа распространить на термы других серий, то минимальное значение квантового числа m будет равно $n^* + 1/2$. Следовательно, минимальное значение квантового числа m совпадает с обычным, ставшим уже традиционным азимутальным

[13] См., например, *Kramers*. Zs. Phys., 1920, **3**, 199.

[14] Шредингер (Zs. Phys., 1921, **4**, 347) считает вероятным, что для s-термов минимальное значение квантового числа m равно 2, а минимальное значение радиального квантового числа равно 3/2. Однако можно считать твердо установленным, что для термов других серий минимальное значение квантового числа m равно 1/2.

квантовым числом n, и мы получаем

$$n^* = n - \frac{1}{2}. \tag{5}$$

Таким образом, возникает следующая модель атома: в центре находится «остов» со средним моментом импульса 1/2, а на периферии — внешний электрон со средним моментом импульса $n - 1/2$. Возникает вопрос: чем именно определяется распределение значений момента импульса $n - 1/2$ и 1/2 между остовом и внешним электроном? Напомним, что между моментами импульса электрона и остова существует магнитное взаимодействие, которое в специально выбранной модели атома удается точно вычислить. Если θ — угол между направлениями моментов, то энергия магнитного взаимодействия составляет

$$\Delta E \sim H_i \cos\theta,$$

где H_i — магнитное поле, создаваемое валентным электроном в окрестности остова. Коэффициент пропорциональности равен (см. введение) произведению «момент импульса остова $\times \frac{e}{2mc}$». Таким образом, энергия взаимодействия равна

$$\Delta E = \frac{1}{2} \frac{h}{2\pi} \frac{e}{2mc} H_i \cos\theta. \tag{6}$$

Угол θ здесь не произвольный: по Зоммерфельду[15], величина его определяется так называемым пространственным квантованием. Принцип пространственного квантования гласит: квантовые числа задают не только вектор момента импульса, но и его проекцию на направление возможного магнитного поля, то есть продольную (относительно магнитного поля) компоненту момента импульса.

Поскольку мы исходим из предположения (5) о том, что

$$n^* = n - \frac{1}{2},$$

то момент импульса электрона принимает полуцелые значения $(1/2, 3/2, \ldots)$. *То же самое предположение необходимо ввести и относительно проекции момента импульса на направление поля* (в данном случае — на направление магнитного поля, создаваемого остовом). Необходимость такого предположения следует хотя бы из того, что мы в любом случае (даже в отсутствие внешнего поля!) должны автоматически включить в область допустимых значений самое естественное положение вектора момента импульса, соответствующее $\theta = 0$ $(\cos\theta = 1)$.

Принятое предположение приводит к соотношению

$$n^* \cos\theta = m_i^*, \tag{7}$$

определяющему допустимые относительные положения атомного остова и валентного электрона.

Аналогичное соотношение

$$n^* \cos\theta_1 = m^* \tag{7a}$$

применяется и при квантовании во внешнем поле. Смысл равенства (7a) будет рассмотрен более подробно в § 2 (с. 17, равенство (17), и с. 28).

[15] *Sommerfeld A.* Ann. d. Phys., 1916, **51**, 1, § 7.

Величина m_i^* в (7) означает «внутреннее» магнитное квантовое число. Как будет показано в дальнейшем, это число может принимать лишь два значения: $+n^*$ и $-n^*$, что соответствует

$$\cos\theta = \pm 1.$$

Итак, мы установили два весьма важных свойства нашей модели атома:

1) длины векторов моментов импульса атомного остова и электрона равны, соответственно $1/2$ и $n - 1/2$;

2) оба вектора направлены в противоположные стороны.

Полный момент импульса атома в первом случае равен

$$n - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = n,$$

во втором случае —

$$n - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = n - 1.$$

Мы утверждаем, что эти случаи соответствуют двум различным уровням энергии, образующим дублет[16]. Физический смысл внутреннего квантового числа n_J становится очевидным: оно задает полный момент импульса атома, в то время как квантовое число определяет сумму длин векторов момента импульса внешнего электрона и остова. В силу этого дублетный уровень с азимутальным квантовым числом n всегда расщепляется на два уровня с внутренними квантовыми числами $n_J = n$ и $n_J = n - 1$. Разность энергий между двумя уровнями, образующими дублет, как следует из (6) и (7), равна[17]:

$$h\Delta\nu = \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}\frac{e}{2mc}H_i - \left(-\frac{1}{2}\right)\frac{h}{2\pi}\frac{e}{2mc}H_i, \tag{8}$$

откуда

$$\Delta\nu = \frac{1}{4\pi}\frac{e}{mc}H_i. \tag{8a}$$

Здесь $\Delta\nu$ означает измеренное в волновых числах (см$^{-1}$) расстояние между двумя линиями.

Итак, мы ввели некую гипотезу о сущности структуры дублета. Выясним теперь, позволяет ли наше допущение продвинуться в решении проблемы аномального эффекта Зеемана.

§2

Поведение дублетного атома во внешнем магнитном поле

Пусть H — напряженность внешнего магнитного поля. Как и во введении, введем величину

$$\Delta\nu_n = \frac{1}{4\pi}\frac{e}{mc}H$$

---

[16] Здесь было бы уместно поставить вопрос о том, почему s-терм не расщепляется в дублет. Если вслед за Шредингером предположить, что s-электрон проникает в остов, то выделенность одинаково направленных моментов импульса внешнего электрона и остова становится весьма вероятной. Во всяком случае противоположно направленным моментам соответствовала бы совершенно иная (причем гораздо меньшая) энергия. Имеющиеся экспериментальные данные убедительно свидетельствуют в пользу синглетного s-уровня.

[17] Величина H_i одинакова для обоих уровней, поскольку зависит лишь от внешнего электрона, который в обоих случаях описывает практически одну и ту же орбиту.

и положим

$$v = \frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_n} = \frac{H_i}{H}.$$

Чтобы определить прежде всего положение орбиты внешнего электрона относительно поля, введем пространственную систему полярных координат с полярной осью, параллельной вектору поля H и зададим положение средней плоскости орбиты (говорить просто о положении орбиты плохо, так как это понятие лишено смысла, так как орбита, вообще говоря, представляет собой пространственную кривую) угловым расстоянием γ_1 [18] линии узлов от плоскости меридиана $\varphi = 0$ и средним моментом импульса $\bar{q}$ относительно прямой, на которой лежит вектор H. Угол θ_1, образуемый направлением момента импульса внешнего электрона с направлением поля, определяется соотношением $\cos\theta_1 = \frac{\bar{q}}{\bar{p}}$ (где $\bar{p}$ — средний момент импульса внешнего электрона). Координаты γ_1, $\bar{q}$ достаточно известны как сопряженные переменные невозмущенного атома водорода. Аналогичным образом положение атомного остова можно описать при помощи угла θ_2, образуемого вектором момента импульса атомного остова с вектором поля H (соответствующий переменной q средний момент импульса $\bar{q}$ остова относительно прямой, на которой лежит вектор H, нас более не интересует), и угла γ_2, который мы интерпретируем как угол между плоскостью меридиана $\varphi = 0$ и линией пересечения плоскости, ортогональной вектору момента импульса атомного остова, с φ-плоскостью. Тогда угол θ_{12} между двумя векторами средних моментов импульса $n^* = n - 1/2$ и $1/2$, как показывают элементарные геометрические соображения, удовлетворяет соотношению

$$\cos\theta_{12} = \cos\theta_1\cos\theta_2 + \sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\gamma_1 - \gamma_2).$$

Заметим также, что

$$-\frac{\partial}{\partial\theta_2}\cos\theta_2 = \cos\theta_1\sin\theta_2 - \sin\theta_1\cos\theta_2\cos(\gamma_1 - \gamma_2).$$

Теперь мы уже в состоянии описать приращение энергии ΔE, вызванное внутренним и внешним полем, как функцию координат. Величина ΔE играет роль возмущения энергии (то, что дублетную структуру и эффект Зеемана можно рассматривать как «малое возмущение», не требует пояснений) и поэтому определяется как некое среднее по времени, причем усреднение по времени надлежит производить по наибольшему периоду невозмущенной системы [19].

Именно с этим усреднением связано то обстоятельство, что несмотря на непостоянство с одной стороны момента импульса валентного электрона, а с другой стороны момента импульса остова, в энергию эффекта Зеемана входит только азимутальное квантовое число. Следовательно, как и в (6), мы получаем

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[n^*\cos\theta_1 + \frac{1}{2}(\cos\theta_2 + v\cos\theta_{12})\right]. \tag{9}$$

Первый член в (9) описывает влияние внешнего поля на валентный электрон, и его можно заменить величиной $\Delta\nu_n h$, второй член учитывает влияние внешнего поля на остов, а третий — энергию взаимодействия.

Для начала, прежде чем вычислять выражение (9) в общем виде, оценим ΔE в предельном случае при $v \sim \infty$ для произвольных значений m^* и наметим

[18] Индекс 1 относится к внешнему электрону, индекс 2 — к остову.

[19] *Bohr N.* On the Quantum Theory of Line Spectra. Part II. P. 41, 87.

доказательство того, что m_i^* может принимать лишь два значения $n^* = n - 1/2$ и $-n^* = -(n-1/2)$. Для этого сформулируем некий общий принцип, справедливый при любом числе λ допустимых значений m_i^*.

Если $\Delta E_1, \Delta E_2, \ldots, \Delta E_\lambda$ — приращения энергии, соответствующие допустимым значениям $m_{i1}^*, m_{i2}^*, \ldots, m_{i\lambda}^*$ квантового числа m_i^*, то должно выполняться соотношение

$$\sum_{k=1}^{\lambda} \Delta E_k = \lambda m^* \Delta\nu h + \text{const}. \tag{10}$$

Здесь m^* означает магнитное квантовое число, значение которого подлежит уточнению. Относительно m^* мы предполагаем здесь, что оно обладает лишь одним свойством: переход $m^* \to m^*$ дает π-компоненты, переход $m^* \to m^* + 1$ дает σ-компоненты. Будет ли m^*, как написано выше, полуцелым или целым, в данном случае не имеет значения.

Введенный нами принцип допускает следующее обоснование. Соображения Рубиновича[20)] относительно излучения момента импульса, если их применять к *отдельному* атому, всегда приводят к нормальному эффекту Зеемана. Действительно, Рубинович требует для σ-компоненты излучения момента импульса $h/2\pi$ относительно прямой, на которой лежит вектор H. Но поскольку при $v \sim \infty$ величина ΔE пропорциональна моменту импульса относительно этой прямой, то это требование приводит к нормальному расщеплению линии. Таким образом, если мы не хотим впасть в противоречие с экспериментом, то необходимо допустить, что принцип Рубиновича выполняется лишь для всей совокупности атомов[21)]. В случае поперечной поляризации излученный полный момент импульса для N атомов составит $N \cdot h/2\pi$. Приняв дополнительное предположение о том, что все λ различных атомов равновероятны, мы приходим к приведенному выше утверждению.

Запишем ΔE (при $v \sim \infty$) как функцию от m_i^* и m^*. Потребуем, чтобы стационарные состояния атома в поле H так же, как в (7), определялись из равенства проекции среднего момента импульса внешнего электрона относительно прямой, на которой лежит вектор H, величине $m^* \cdot h/2\pi$. (При $m^* = \pm n^*$ это требование совпадает с (7а).) В дальнейшем будет показано, что для m^* выполняется принцип отбора. Пусть J — полный момент импульса атома, Θ — угол, образуемый J с прямой, на которой лежит вектор H. Тогда (так как $\cos\theta = m_i^*/n^*$, см. (7))

$$J = \sqrt{n^{*2} + 2\frac{1}{2}n^* \cos\theta + \left(\frac{1}{2}\right)^2} = \sqrt{n^{*2} + m_i^* + \left(\frac{1}{2}\right)^2}.$$

Средний момент импульса $\bar{p}$ внешнего электрона возникает теперь при усреднении и по движениям, вызванным полем H_i, и совпадает с проекцией вектора $\bar{p} = n^* h/2\pi$ на направление вектора J. В силу «ларморовской прецессии» магнитного поля H_i (поскольку $H \ll H_i$, то возмущение, вносимое в ларморовскую прецессию, пренебрежимо мало) векторы n^* и $1/2$ также прецессируют вокруг. Из геометрических соображений ясно, что

$$\bar{p} = \frac{J^2 + n^{*2} - \left(\frac{1}{2}\right)^2}{2J}\,\frac{h}{2\pi}.$$

20) *Rubinowicz*. Zs. Phys., 1918, **19**, 441, 465.

21) Приняв это допущение, мы приходим в определенное противоречие с классическим излучением. Следствия из этого физически необычайно важного результата будут рассмотрены в другой работе.

Поскольку $\Delta E = \left(J\cos\Theta + \frac{1}{2}v\cos\theta\right)$ и $\cos\Theta = \frac{m^*\cdot\frac{h}{2\pi}}{\bar{p}}$, то

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[\frac{2\left(n^{*2}+m_i^*+\left(\frac{1}{2}\right)^2\right)}{2n^{*2}+m_i}m^* + \frac{v}{2}\frac{m_i^*}{n^*}\right] =$$

$$= \Delta\nu_n h\left[\left(1+\frac{m_i^*+\frac{1}{2}}{2n^{*2}+m_i^*}\right)m^* + \frac{v}{2}\frac{m_i^*}{n^*}\right]. \tag{11}$$

Равенство (10) позволяет теперь определить λ и m_i^*:

$$\sum_{k=1}^{\lambda}\left(1+\frac{m_{ik}^*+1}{2n^{*2}+m_{ik}^*}\right) = \lambda, \quad \text{т. е.} \quad \sum_{k=1}^{\lambda}\frac{m_{ik}^*+\frac{1}{2}}{2n^{*2}+m_{ik}^*} = 0.$$

Если m_{ik}^* желательно представить как функцию от n^*, то оказывается, что последнему равенству удовлетворяют значения $\lambda = 2$, $m_{i1}^* = n^*$, $m_{i2}^* = -n^*$ и только эти значения. Значение $m_i^* = -1/2$ выпадает из числа допустимых, так как оно привело бы к движению атомного остова, что противоречит, например, поведению атома водорода с нулевым моментом импульса относительно прямой, на которой лежит вектор поля, во внешнем поле. Согласно теории Бора, такое состояние движения запрещено. Таким образом, равенство (10) отбирает из множества виртуальных значений m_i^* два допустимых значения.

Подставив в равенство (11) оба известных теперь значения m_i^* (n^* и $-n^*$), получим формулы Ланде для аномального эффекта Зеемана ($H \ll H_i$):

$$\Delta E_1 = \Delta\nu_n h\left[m^*\left(1+\frac{1}{2n-1}\right)+\frac{v}{2}\right],$$

$$\Delta E_2 = \Delta\nu_n h\left[m^*\left(1-\frac{1}{2n-1}\right)-\frac{v}{2}\right].$$

Вернемся теперь к общему случаю (с произвольным v). Угол θ_1 в (9) будет определен позднее. Что касается угла θ_2, то примем сначала дополнительное предположение. Оно сводится просто к требованию, чтобы направление вектора момента импульса атомного остова всегда совпадало с направлением равнодействующей полей H и H_i. В этом случае интересующий нас переход от слабых полей H к сильным полям представляет собой адиабатический процесс (который при $H \ll H_i$, разумеется, приводит к $\cos\theta_{12} = +1$). Это следует из того, что при указанных условиях фазовый интеграл остова относительно направления поля, т. е. проекция среднего момента импульса на равнодействующую полей H и H_i, сохраняет инвариантность.

Ориентацию равнодействующей удобнее всего определить из принципа виртуальных перемещений, положив $\frac{\partial\Delta E}{\partial\theta_2} = \frac{\partial\Delta E}{\partial\gamma_2} = 0$ при постоянном θ_1. Если обозначить через X часть приращения энергии, связанную с остовом, то

$$X = \cos\theta_2 + v\cos\theta_{12}. \tag{12}$$

При условиях

$$-\frac{\partial X}{\partial\theta_2} = 0 = \sin\theta_2 - v\frac{\partial}{\partial\theta_2}\cos\theta_{12} \tag{13}$$

и

$$\frac{\partial X}{\partial \gamma_2} = 0, \quad \text{т. е.} \quad \sin(\gamma_1 - \gamma_2) = 0. \tag{14}$$

Три вектора моментов импульса всегда лежат в одной плоскости. Умножив сначала равенство (12) на $\cos\theta_2$ и равенство (13) на $\sin\theta_2$, а затем равенство (12) на $\cos\theta_{12}$ и равенство (13) на $-\frac{\partial}{\partial\theta_2}\cos\theta_{12}$, получим при сложении

$$X\cos\theta_{12} = 1 + v\cos\theta_1$$

и

$$X\cos\theta_{12} = \cos\theta_1 + v\left[\cos^2\theta_1 + \sin^2\theta_1\cos^2(\gamma_1 - \gamma_2)\right] = v + \cos\theta_1.$$

Если умножить (12) на X и подставить значения $X\cos\theta_2$ и $X\cos\theta_{12}$, то мы придем к равенству

$$X^2 = 1 + 2v\cos\theta_1 + v^2. \tag{15}$$

Возвращаясь снова к равенству (11) и подставляя вместо $\cos\theta_1$ отношение $\frac{\bar{q}}{\bar{p}} = \frac{2\pi\bar{q}}{n^*h}$, получаем

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[\frac{2\pi\bar{q}}{h} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + 2\frac{2\pi\bar{q}}{n^*h}v + v^2}\right]. \tag{16}$$

Весьма примечательно, что из формулы приращения энергии выпал угол γ_1. Это означает, что при вычислении возмущений угол γ_1 надлежит рассматривать как циклическую координату. Отсюда напрашиваются два вывода[22]:

1) при помощи вводимого нами квантового числа m^* (см. (7а)) мы распространили правило квантования

$$\int_0^{2\pi} \bar{q}\,d\gamma = 2\pi\bar{q} = m^* \tag{17}$$

на произвольное поле;

2) для m^* выполняется принцип отбора известного типа (переход $m^* \to m^*$ дает π-компоненты, переход $m^* \to m^* + 1$ дает σ-компоненты); то, что m^*, как подчеркивается самим обозначением, принимает лишь полуцелые значения $(\pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2, \ldots)$, обусловлено соотношением (7).

Если подставить (17) в (16), то получится

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[m^* \pm \frac{1}{2}\sqrt{1 + 2\frac{m^*}{n^*}v + v^2}\right]. \tag{18}$$

Так же, как соотношение (3) во введении, это равенство описывает аномальный эффект Зеемана для дублета. Равенство (18) необходимо дополнить условием $|m^*| < n_J$. (Оно будет обосновано в только что упоминавшейся работе, которая подготавливается к печати.) Итак, применяя к нашему гипотетическому дублетному атому квантотеоретическую теорию возмущений, мы получаем ту же формулу, к которой приводит экстраполяция из теории Фойгта, и тем самым достигаем согласия со всеми наблюдениями, накопленными к настоящему времени относительно аномального эффекта Зеемана в дублетных системах. В последующей работе, проводимой совместно с проф. Зоммерфельдом, будет показано,

[22] См. также: *Bohr N.* On the Quantum Theory of Line Spectra. Part II. P. 54–60.

что в рамках построенной выше теории принцип соответствия позволяет получить удовлетворительное решение вопроса об интенсивности линий. В частности, удалось обосновать исчезновение некоторых компонент в эффекте Пашена—Бака и нарушение принципа отбора для n_J при наложении магнитного поля[23]. Изложенные нами соображения позволяют дать простую и наглядную интерпретацию эффекта Пашена—Бака. В то время как орбита внешнего электрона в любом поле от слабого до сильного неизменно занимает одно и то же положение относительно внешнего поля, атомный остов по мере увеличения напряженности внешнего поля постепенно поворачивается до тех пор, пока при полном эффекте Пашена—Бака момент импульса остова не расположится параллельно вектору поля. Кроме того, в общем случае при полном эффекте Пашена—Бака результирующие линии тонкой структуры лоренцовского триплета остаются по величине того же порядка, что и первоначальный дублет, аналогично тому, как это происходит, например, с атомом водорода в случае эффекта Штарка. Новейшие наблюдения Пашена показывают, что для $\lambda = 6\,708$ Å лития этот результат теории подтверждается количественно, однако исследования, проводимые в этом направлении, еще не завершены.

Точную проверку теории при средних магнитных полях удалось провести лишь для случая типа D-линий[24]. Кроме того, начало изучению «магнитного влияния» было положено Пашеном (см. работу[25]), производившим измерения над запрещенными линиями d_1p_2 в различных магнитных полях. Пашен наблюдал некоторое «смещение θ», которое примешивалось к смещению линий, вызываемому обычным аномальным эффектом Зеемана. Эти смещения можно вычислить теоретически по формуле (18), если $\Delta\nu$ и H известны из эксперимента. В качестве примера мы приведем результаты таких расчетов для Al ($\Delta\nu_{3d} = 1{,}32$ см$^{-1}$ $= 0{,}125$ Å). Совпадение полное.

Таблица 1

$\lambda = 3\,802{,}1$ Å; $\gamma = 2p_2 - 3d_1$; $H = 39\,000$ гаусс (θ, Å)

Расщепление в $\Delta\lambda_{\text{норм}}$	$\theta_{\text{набл}}$	$\theta_{\text{вычисл}}$	$\theta_{\text{набл}} - \theta_{\text{вычисл}}$
σ +22/15	−0,054	−0,060	+0,060
σ +14/15	—	−0,050	—
π +4/15	—	−0,050	—
π −4/15	−0,042	−0,039	−0,003
σ −14/15	−0,035	−0,039	+0,004
σ −22/15	−0,023	−0,023	0,000

§ 3
Количественные следствия относительно величины дублетного расщепления в периодической системе

Простые расчеты величины дублетного расщепления, очевидно, можно считать сколько-нибудь надежными лишь при условии, если остов в первом приближении

[23] *Paschen F., Back E.* Zeemanjubiläumsschrift. Physica, 1921, **1**, 261.

[24] *Kent.* Astrophys. Journ., 1914, **40**, 343.

[25] *Paschen F., Back E.* Zeemanjubiläumsschrift. Physica, 1921, **1**, 261.

допустимо рассматривать как бесконечно малый. Для p-терма это предположение выполняется лишь для ^{3}Li, для d-терма — для ^{11}Na и в гораздо меньшей степени — для ^{19}K. Размеры остова, т.е. радиус иона, сильно убывает с увеличением порядкового номера элемента[26]. Прежде чем мы рассмотрим более подробно ход этой зависимости при возрастании порядкового номера, вычислим дублетное $2p$-состояние лития при самых простейших предположениях. Будем считать, что орбита внешнего электрона плоская, а величина дублетного расщепления зависит лишь от магнитного взаимодействия. (В принципе последнее предположение не использовалось в предыдущих рассуждениях: мы исходили из допущения о существовании лишь одного взаимодействия, входящего в (9) с $\cos\theta_{12}$.) Тогда орбита внешнего электрона будет определяться двумя осями[27]: большой полуосью $a_1 = a \cdot 2^2 = 4a$ и малой полуосью $a_2 = a \cdot 2 \cdot 3/2 = 3a$, где a — радиус атома водорода. Эффективный заряд ядра для внешнего электрона равен 1.

Магнитное поле вблизи остова можно вычислить по закону Био—Савара

$$\mathbf{H} = \frac{e}{c}\frac{[\mathbf{vr}]}{r^3} = \frac{e}{mc}\frac{m[\mathbf{vr}]}{r^3}, \tag{19}$$

где r — расстояние от ядра, $m[\mathbf{vr}]$ — момент импульса электрона, равный как таковой $\frac{h}{2\pi}\frac{3}{2}$. Поскольку нас интересует среднее значение поля H_i, необходимо вычислить величину $\frac{1}{r^3}$. Вводя эксцентрическую аномалию и эксцентриситет ε, получаем

$$\overline{\frac{1}{r^3}} = \frac{1}{2\pi}\int\limits_0^{2\pi}\frac{du}{a_1^3(1+\varepsilon\cos u)^3} = \frac{1}{a_1^3(1-\varepsilon^2)^{3/2}} = \frac{1}{a_2^3}. \tag{20}$$

Из (19) и (20) следует, что

$$\overline{H}_i = \frac{h}{2\pi}\frac{e}{mc}\frac{1}{a^3 2^3\left(\frac{3}{2}\right)^2}. \tag{19a}$$

Согласно (8a) расщепление равно

$$\Delta\nu = \overline{H}_i\frac{1}{4\pi}\frac{e}{mc}.$$

Подставляя известные численные значения

$$h = 6{,}55\cdot 10^{-27};\quad \frac{e}{mc} = 1{,}77\cdot 10^7 \quad \text{и} \quad a = 0{,}532\cdot 10^{-8},$$

получаем

$$\Delta\nu_{2p} = 0{,}32\ \text{см}^{-1}.$$

Эмпирическое значение (по Кенту) составляет 0,34 см$^{-1}$. Если учесть, что в основу расчета положено весьма грубое приближение, то совпадение следует признать весьма хорошим. Из (19a) мы получаем также закон убывания $\Delta\nu$ в первых членах серии с увеличением азимутального квантового числа:

$$\Delta\nu \sim \frac{1}{n^3\left(n-\frac{1}{2}\right)^2}.$$

---

[26] *Grimm*. Zs. Phys. Chem., 1921, **98**, 353.

[27] См., например, *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl. Kap. 4. S. 290. Следует иметь в виду, что вместо n и n' следует подставить полуцелые числа, равные для Li($2p$) 3/2 и 1/2, соответственно.

Следовательно, если пренебречь другими различиями, то величина $\Delta\nu_{3d}$ составляет

$$\Delta\nu_{3d} = \frac{2^3\left(\frac{3}{2}\right)^2}{3^3\left(\frac{5}{2}\right)^2}\Delta\nu_{2p} = 0{,}11\Delta\nu_{2p}\,.$$

(Разумеется, более заметные отклонения от закона убывания $\Delta\nu$ появятся в тех случаях, когда атомный остов можно считать бесконечно малым для d-терма, но для p-терма такое допущение становится уже неприменимым: тогда $\Delta\nu_{3d} < 0{,}11\Delta\nu_{2p}$.) Для лития величина $\Delta\nu_{3d}$ составила бы 0,035 см^{-1}. С величиной этого порядка хорошо согласуются данные измерений Кента, получившего для $\Delta\nu_{2p}$ во второй побочной серии 0,34 см^{-1}, а в первой побочной серии — лишь 0,327 см^{-1} (различие результатов Зоммерфельд объясняет мультиплетностью d-терма). Действительно, в первой побочной серии следовало бы ожидать картину линий типа сложных дублетов, расстояние между центрами тяжести которых составляло бы около 0,32. Разумеется, к последним знакам после запятой следует относиться с достаточной осторожностью.

Что касается изменения величины дублетного расщепления с увеличением порядкового номера элемента, то здесь следует иметь в виду три причины.

1. Если остов недопустимо считать бесконечно малым, то эффективный заряд ядра для внешнего электрона не будет в точности равен 1, а окажется несколько больше, например, $Z_{\text{эфф}}$. Поле H_i, как следует из (19), пропорционально $1/r^3$. Поскольку расстояние r от ядра в свою очередь пропорционально $Z^3_{\text{эфф}}$, то H_i пропорционально $Z^3_{\text{эфф}}$.

2. Если внешний электрон и остов приближенно представить двумя электронными орбитами радиуса r_1 и r_2, то магнитное взаимодействие по мере приближения к равенству $r_1 = r_2$ стремится к бесконечности. Чем ближе орбита внешнего электрона к остову, тем больше энергия взаимодействия.

3. Когда орбиты электронов очень сильно приближаются к остову, разумно предположить, что различие между орбитами в значительной мере обусловлено не только магнитными, но и электрическими величинами. Можно даже поставить вопрос о том, не наблюдается ли такая ситуация в случае легких атомов (например, в случае лития) и не превосходят ли электрические различия по порядку величины магнитные различия. Подобное допущение нежелательно, поскольку даже то, что спектральные серии удается описать модифицированным полем ядра, указывает на важную роль симметрии остова — симметрии, понимаемой не в геометрическом, а в физическом смысле.

Перечисленные нами соображения позволяют понять общее увеличение дублетной разности $\Delta\nu$ с возрастанием порядкового номера Z. Однако приведенных соображений недостаточно для обоснования количественного закона увеличения $\Delta\nu$ (приблизительно как Z^2): для этого необходимо ввести специальные предположения относительно строения оболочек.

§ 4

Общие соображения относительно триплетных атомов

Как подчеркивалось во введении п. 2, триплетному атому, если мы хотим быть последовательными, необходимо приписать два валентных электрона. Следовательно, к нашему дублетному атому мы присоединяем еще один s-электрон с моментом импульса, распределив этот момент импульса поровну между остовом и электронами. Тем самым для основной орбиты триплетного атома возникают две возможности.

1. Атомный остов получает средний момент импульса 0, один валентный электрон имеет средний момент импульса 1/2, другой — 1/2. В этом случае полный момент импульса атома равен 0, поэтому атом диамагнитный. Поскольку полный момент импульса равен 0, то эта конфигурация особенно устойчива. *Она порождает основной терм* 1*s простых линий.* Из соображений, полностью аналогичных приведенным в случае дублета, следует, что это утверждение допускает обобщение: в возбужденном состоянии один из валентных электронов обладает средним моментом импульса $n-1/2$, в то время как средний момент импульса другого равен $-1/2$. Распределение средних моментов импульса $n-1/2$ и $+1/2$ мы исключаем по тем же соображениям, которые позволили нам прийти к заключению о простоте s-терма в случае дублета. Следовательно, полный момент импульса атома равен $n-1$, что согласуется с внутренним квантовым числом n_J, которое Ланде[28] поставил в соответствие простым линиям. Причина, по которой мы имеем здесь дело истинно с простыми линиями, очевидно, состоит в том, что атомный остов имеет средний момент импульса, равный 0. Действительно, как было установлено еще в случае дублета, *отличие от нуля магнитного момента атомного остова является необходимым и достаточным условием существования структуры линий и аномального эффекта Зеемана.* Таким образом, триплетный атом всегда должен содержать систему простых линий, что и наблюдается в спектрах соответствующих элементов.

2. Вторая возможность для s-терма состоит в следующем: атомный остов обладает средним моментом импульса $+1$, внутренний валентный электрон — средним моментом импульса $+1/2$, и внешний валентный электрон — таким же моментом импульса. Полный момент импульса атома в этом случае равен 2, что полностью соответствует расщеплению термов, установленному Ланде для s-терма в случае эффекта Зеемана. В возбужденном состоянии такой атом (подлинно триплетный атом) выглядел бы следующим образом: остов обладает средним моментом импульса 1, внутренний валентный электрон наделен средним моментом импульса 1/2, и внешний валентный электрон — средним моментом импульса $n-1/2$. Как и в случае дублетного атома, взаимное расположение трех векторов момента устанавливает магнитная связь. Прежде всего мы констатируем, что s-терм должен быть простым. Действительно, как показал Шредингер, оба s-электрона проникают в остов. Следовательно, случай, когда все три вектора момента импульса направлены в одну сторону, выделен. Кроме того, взаимодействие слишком сильно для того, чтобы допускать другие расположения векторов, кроме того, при котором все три момента импульса направлены в одну сторону. Такой вывод справедлив для внутреннего валентного электрона в самом общем случае, в том числе и для возбужденных состояний. Таким образом, можно утверждать, что с точностью до величин порядка

$$\delta = \frac{\text{связь внешнего электрона с остовом}}{\text{связь внутреннего электрона с остовом}}$$

средний момент импульса системы «атомный остов + внутренний электрон» равен 3/2.

Взаимное расположение импульса в рассматриваемом случае также определяется пространственным квантованием (на этот раз — двух электронов относительно остова и его поля). Обозначим индексом 1 внешний электрон, индексом 2 — внутренний электрон и индексом 3 — остов. Тогда условие квантования, соответствующее равенству (7), будет иметь вид

$$\frac{1}{2}\cos\theta_{23} + n^*\cos\theta_{13} = m_i. \tag{21}$$

[28] *Landè A.* Über das Serienspectrum des Ne und Hg. Zs. Phys., 1921, **22**, 417.

Здесь m_i принимает целочисленные значения, и $n^* + 1/2$ — целое число. Поскольку положение остова относительно внутреннего электрона определяется соотношениями $\theta_2 = \theta_3$, $\cos\theta_{23} = 1$ [29], то соотношение (21) позволяет получить угол $\theta_{13} = \theta_{12}$ между моментами импульса 3/2 и $n - 1/2$:

$$n^* \cos \cos_{12} = m_i^*.$$

Как будет показано в дальнейшем, квантовое число m_i^* должно принимать три значения

$$m_i^* = n^*,\ 0,\ -n^* \quad \left(= n - \frac{1}{2},\ -\frac{1}{2},\ -\left(n - \frac{1}{2}\right)\right).$$

Таким образом, для триплета возможны три типичных случая: моменты импульса электрона и остова направлены в одну сторону, моменты импульса электрона и остова направлены в противоположную сторону и «поперечное» расположение момента импульса остова относительно момента импульса электрона. Вычислим теперь расстояние между самым верхним и самым нижним уровнями триплета $\Delta\nu_{13}$ в волновых числах. Если H_i снова означает внутренне поле взаимодействия, то

$$\Delta\nu_{23} = \left[\left(+\frac{3}{2}\right)H_i - \left(-\frac{3}{2}\right)H_i\right] \frac{1}{4\pi} \frac{e}{mc} = \frac{3}{4\pi} \frac{e}{mc} H_i. \tag{22}$$

Положение вектора момента импульса атомного остова (см. § 2) при произвольном v для верхнего и нижнего уровней триплета формально можно определить из условия

$$\frac{\partial}{\partial\theta_2}\Delta E = 0, \quad \frac{\partial}{\partial\gamma_2}\Delta E = 0$$

при постоянном θ_2.

§ 5
Поведение триплетного атома в магнитном поле

Ответ на вопрос об эффекте Зеемана весьма несложен в простейшем из возможных вариантов: если речь идет о системе простых линий. Условие пространственного квантования, в поле H соответствующее [30] равенству (21), гласит:

$$\frac{1}{2}\cos\theta_2 + n^* \cos\theta_1 = m. \tag{23}$$

Записав выражение для возмущения энергии, получаем, как в соотношении (11),

$$\Delta E = \Delta\nu_n h \left[n^* \cos\theta_1 + \frac{1}{2}\cos\theta_2 + \frac{1}{2} v \cos\theta_{12}\right] = \Delta\nu_n h \left[m + \frac{v}{2}\cos\theta_{12}\right]. \tag{24}$$

Как следует из допущений, введенных в § 4, $\cos\theta_{12}$ при $v \sim \infty$ обращается в -1. Таким образом, при слабом поле H мы получаем уже нормальный эффект

[29] Эти соотношения выполняются с точностью до величин порядка δ, которыми мы пренебрегаем, что дает для легких атомов достаточно хорошее приближение.

[30] В само равенство (21) входит поле H_i взаимодействия. По аналогии с равенством (7а) соотношение (23) при $\cos\theta_{12} \neq \pm 1$ следует несколько обобщить.

Зеемана, который не может измениться при возрастании H. Следовательно, ΔE можно представить в виде

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left(m - \frac{v}{2}\right). \tag{25}$$

То, что в случае системы простых линий наблюдается нормальный эффект Зеемана, ясно заранее, поскольку момент импульса остова равен нулю.

Совершенно аналогично можно записать возмущение энергии и во втором случае: для истинно триплетных термов. Оно оказывается равным

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[n^* \cos\theta_1 + \frac{3}{2}\cos\theta_2 + \frac{3}{2}v\cos(\theta_1 - \theta_2)\right]. \tag{26}$$

Условие $\frac{\partial}{\partial\gamma_2}\Delta E = 0$, $\theta_{12} = \theta_1 - \theta_2$ здесь уже учтено. Обозначим, как в случае дублета, $\cos\theta_2 + v\cos(\theta_1 - \theta_2)$ через X. Ограничимся сначала самым верхним и самым нижним уровнями триплета и определим ΔE при произвольном значении v. Чтобы найти ΔE, у нас имеется четыре уравнения:

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[n^* \cos\theta_1 + \frac{3}{2}X\right], \tag{27}$$

$$X = \cos\theta_2 + v\cos(\theta_1 - \theta_2), \tag{28}$$

$$\frac{\partial X}{\partial\theta_2} = 0 = \sin\theta_2 + v\sin(\theta_2 - \theta_1) \tag{29}$$

и условие квантования (23).

Как и в § 2, из (28) и (29) следует, что

$$X^2 = 1 + 2v\cos\theta_1 + v^2. \tag{30}$$

Кроме того, из (29) можно вывести соотношение

$$0 = \sin\theta_2(1 + v\cos\theta_1) - v\sin\theta_1\cos\theta_2.$$

Проделав несложные тригонометрические преобразования, получим

$$\cos\theta_2 = \frac{1 + v\cos\theta_1}{\sqrt{1 + 2v\cos\theta_1 + v^2}} = \frac{1 + v\cos\theta_1}{X}. \tag{31а}$$

Подставив в (31а) $\cos\theta_2$ из (23), мы придем к соотношению

$$2(m - n^*\cos\theta_1) = \frac{1 + v\cos\theta_1}{X},$$

откуда

$$\cos\theta_1 = \frac{2mX - 1}{2n^*X + v}. \tag{31б}$$

Из (30) и (31б) находим:

$$X^2 - 1 - v^2 = 2v\frac{Xm - 1}{2Xn^* + v},$$

или

$$X^3 + \frac{v}{2n^*}X^2 - X\left(1 + \frac{2m}{n^*}v + v^2\right) - \frac{v^3 - v}{2n^*} = 0. \tag{32}$$

Итак, мы получили кубическое уравнение для X, из корней которого лишь два имеют физический смысл. Третий корень соответствует мнимому углу.

Для самого верхнего и самого нижнего уровней триплета переход от X к ΔE осуществляется по формуле [см. (27), (31b)]

$$\Delta E = \Delta\nu h\left[n^*\frac{2X_m - 1}{2X_{n^*} + v} + \frac{3}{2}x\right]. \tag{33}$$

При слабом магнитном поле H ($v \sim \infty$) два физических корня уравнения (32) имеют следующий вид:

$$X = v + \frac{m}{n}, \quad X = -v - \frac{m}{n-1}.$$

Если отношение $\Delta E/(\Delta\nu_n h)$ для первого, второго и третьего уровней триплета обозначить для краткости $\Delta E_1'$, $\Delta E_2'$, $\Delta E_3'$, то при $v \sim \infty$

$$\Delta E_1 = \frac{3}{2}v + m\left(1 + \frac{1}{n}\right), \quad \Delta E_3' = -\frac{3}{2}v + m\left(1 - \frac{1}{n-1}\right). \tag{34}$$

К обсуждению этих результатов мы перейдем несколько позже.

Сначала нам необходимо доказать, что m_i^* может принимать лишь три значения: n^*, O^* и $-n^*$. Ход доказательства аналогичен приведенному в § 2 и сводится к вычислению ΔE при $v \sim \infty$ и произвольном значении m_i^*.

Возмущение энергии ΔE определяется соотношением

$$\Delta E = \left[J\cos\Theta + \frac{3}{2}v\frac{m_i^*}{n^*}\right]\Delta\nu_n h.$$

Полный момент импульса J в силу того, что $\cos\theta_{12} = m_i^*/n^*$, можно представить в виде

$$J = \sqrt{n^{*2} + 2\cos\theta_{12}\frac{3}{2}n^* + \left(\frac{3}{2}\right)^2} = \sqrt{n^{*2} + 3m_i^* + \left(\frac{3}{2}\right)^2}.$$

Из соотношения (23) следует, что $\cos\Theta$ (где Θ — угол между полным моментом импульса и вектором поля) равен $m/\bar{p}_{12}$, где $\bar{p}_{12}$ — среднее значение моментов импульса n^* и 1/2 и, следовательно, их проекция на направление вектора **J**. Векторная сумма моментов n^* и 1/2 имеет абсолютную величину $\sqrt{n^{*2} + (1/2)^2 + m_i^*}$, в силу чего проекция ее на J равна

$$\bar{p}_{12} = \frac{n^{*2} + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + m_i^* + J^2 - 1}{2J}.$$

Отсюда находим ΔE

$$\Delta E = \Delta\nu_n h\left[\frac{2\left(n^*2 + \left(\frac{3}{2}\right)^2 + 3m_i^*\right)}{2n^{*2} + \frac{3}{2} + 4m_i^*}m + \frac{3}{2}v\frac{m_i^*}{n^*}\right] =$$

$$= \Delta\nu_n h\left[\left(1 + \frac{2(m_i^* + \frac{3}{2})}{2n^{*2} + 4m_i^* + \frac{3}{2}}\right)m + \frac{3}{2}v\frac{m_i^*}{n^*}\right].$$

Соотношение (10) накладывает условие на величины m_i^*:

$$\sum_{k=1}^{\lambda} \frac{2(m_{ik}^* + \frac{3}{2})}{2n^{*2} + 4m_{ik}^* + \frac{3}{2}} = 0.$$

Если m_i^* рассматривать как функцию от n, то выясняется, что условию на m_i^* удовлетворяет набор значений $\lambda = 3$, $m_{i1}^* = n^*$, $m_{i2}^* = 0$, $m_{i3}^* = -n^*$ и только этот набор. Следовательно, подобно тому, как в случае одного валентного электрона мы с необходимостью приходим к дублету, в случае двух валентных электронов мы с такой же необходимостью приходим к триплету. Случай $m_i^* = -3/2$ при $n > 2$ надлежит исключить по тем же соображениям, по которым мы сочли недопустимым значение $m_i^* = -1/2$ для дублета.

Подставив в ΔE найденные значения m_i^* при $v \sim \infty$, получим формулы Ланде (при $H \ll H_i$), выведенные ранее другим способом для ΔE_1 и ΔE_3:

$$\begin{aligned} \Delta E_1 &= \Delta\nu_n h \left[m\left(1 + \frac{1}{n}\right) + \frac{3}{2}v \right], \\ \Delta E_2 &= \Delta\nu_n h \left[m\left(1 - \frac{1}{n} + \frac{1}{n-1}\right) + \frac{3}{2}\frac{O^*}{n^*}v \right], \\ \Delta E_3 &= \Delta\nu_n h \left[m\left(1 - \frac{1}{n-1}\right) - \frac{3}{2}v \right]. \end{aligned} \tag{35}$$

Для этого частного случая равенство (10) преобразуется к виду

$$\Delta E_1 + \Delta E_2 + \Delta E - 3 = \Delta\nu_n h\left(3m + \frac{3}{2}v\frac{O^*}{n^*}\right). \tag{36}$$

Вопреки выводу соотношение (36) должно выполняться при любых значениях v и в связи с соотношением (33) позволяет получать без каких бы то ни было выкладок ΔE_2 для средних и сильных полей. То, что получающаяся энергия среднего уровня триплета действительно соответствует адиабатическому переходу из (35) следует, во-первых, для ΔE_1 и ΔE_2 — из их вывода и, во-вторых, из вида правой части соотношения (36).

Перейдем теперь к обсуждению результатов. Сравнение соотношений (34) и (35) с соотношением (4) из введения показывает, что развитая нами теория дает исчерпывающее описание аномального эффекта Зеемана (относительно условия $|m| < n_J$ см. с. 17). Действительно, при $v = 0$ соотношения (32) и (36) дают эффект Пашена—Бака:

$$\Delta E_1' = m + 1, \quad \Delta E_2' = m, \quad \Delta E_3' = m - 1.$$

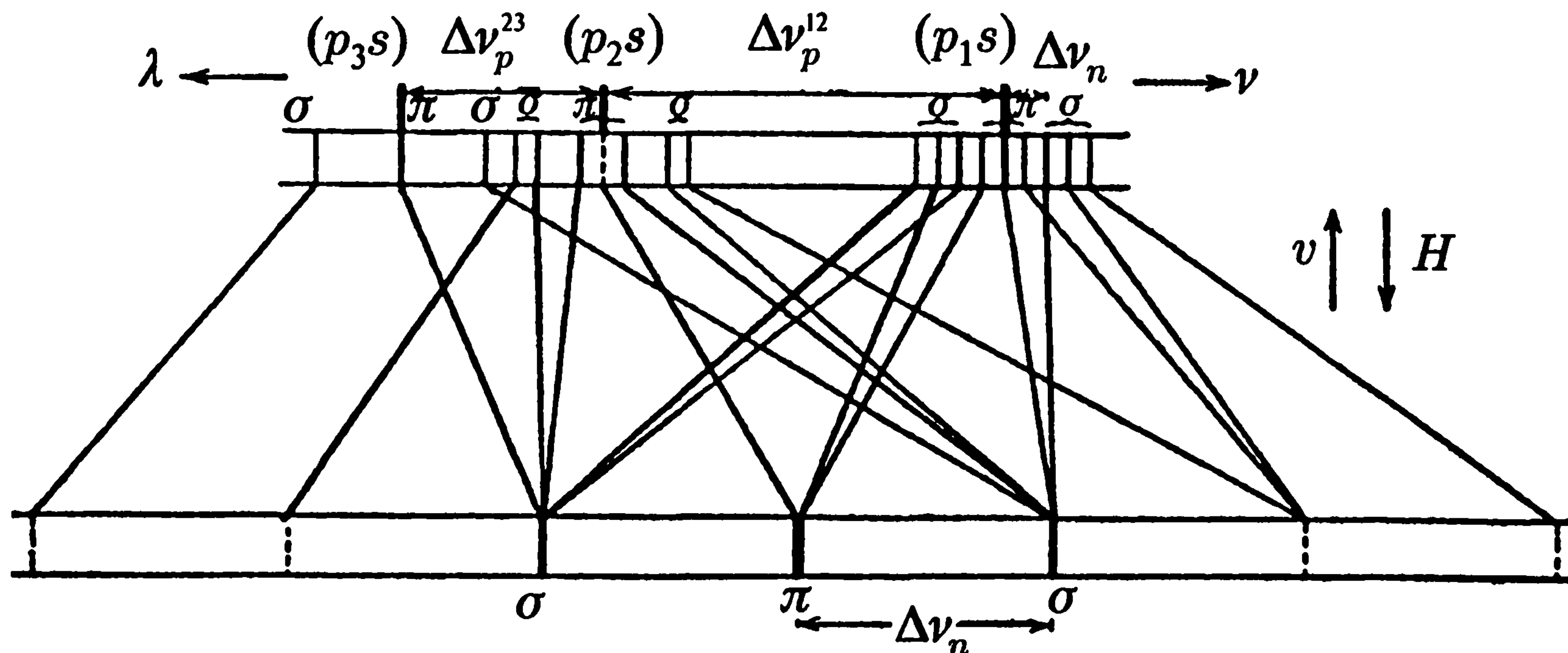
Отдельные магнитные уровни обладают весьма характерными смещениями. Совпадение этого результата с экспериментальными данными по частичному эффекту Пашена—Бака для линий $(p_i d)$ магния было подробно проверено Зоммерфельдом[31]. На рисунке показана схема переходов линий в триплете sp_i от аномального эффекта Зеемана до эффекта Пашена—Бака. Соответствующая схема для дублетной структуры приведена в статье Зоммерфельда[32]. Провести количественное сравнение теоретических результатов для средних магнитных полей с экспериментом до сих пор не представляется возможным. Единственные данные, которыми мы располагаем, — измерения Пашена и Бака[33] над триплетом $\lambda = 3\,947$ Å кислорода.

[31] *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl. Kap. 6. S. 495.

[32] *Sommerfeld A.* Zs. Phys., 1922, **8**, 257.

[33] *Paschen F., Back E.* Ann. d. Phys., 1913, **40**, 960.

Они весьма хорошо согласуются с приведенными выше результатами. Например, соотношения (35) и (36) требуют, чтобы результирующие средние π-компонент в сильных полях оставались строго (т. е. с точностью не до величин порядка v, а до величин порядка v^2) простыми, и чтобы расстояния между линиями, образующими тонкую структуру обеих σ-компонент, оставались того же порядка, как и расстояния между линиями первоначального триплета. Оба вывода, а также теоретическое положение π-компоненты ($\Delta E_\pi = v/2$ при $v \ll 1$) полностью подтверждается на снимках. Однако вследствие размытости линий при средних магнитных полях удается установить лишь качественное совпадение между теорией и экспериментом. Еще одна возможность количественной проверки открывается в связи со «сдвигами θ» (см. с. 17), измеренными на запрещенных линиях (p_2d_3 и т. д.). В этих сдвигах отчетливо заметен теоретически предсказанный ход. Однако из-за пренебрежения величинами порядка δ прямое вычисление величины θ не дает надежных результатов.



Относительно точности наших формул при средних магнитных полях необходимо сделать еще одно общее замечание, относящееся и к дуплетам. Наши вычисления проводились в существенно идеализированных предположениях. Например, однородности поля H_i вблизи остова, отсутствия электрических помех. Ясно, что в предельных случаях при $v \ll 1$ и $v \gg 1$ погрешностью, вносимой такими предположениями, в равной мере допустимо пренебречь, однако при $v \sim 1$ она становится довольно ощутимой. Весьма вероятно, что именно ею объясняются, например, небольшие расхождения между теорией Фойгта и экспериментом, установленные Кентом для $\lambda = 6\,708$ Å лития в области средних полей. До сих пор теоретические формулы дают великолепную сходимость с экспериментом только в первом приближении. Абсолютно точные вычисления станут возможными лишь после того, когда станут известны все подробности модели.

§ 6

Количественные следствия для расстояний между линиями триплета

В качестве важнейшего результата сошлемся на вывод из формул (34) и (35) отношения расстояний между линиями триплета $\Delta\nu^{12}/\Delta\nu^{23}$ (в отсутствие магнитного поля). Оно оказывается равным

$$\frac{\Delta\nu^{12}}{\Delta\nu^{23}} = \frac{1 - \frac{O^*}{n^*}}{1 + \frac{O^*}{n^*}} = \frac{1 + \frac{1}{2n^*}}{1 - \frac{1}{2n^*}} = \frac{n}{n-1}.$$

Это равенство означает, что для p-терма $\Delta\nu_p^{12}/\Delta\nu_p^{23} = 2$, для d-терма $\Delta\nu_d^{12}/\Delta\nu_d^{23} = 1{,}5$.

В спектроскопии давно известно, что указанное отношение характерно для p и d-термов. Оно позволяет четко отличать магнитный триплет от релятивистского. Как показывает таблица[34], для легких элементов величина отношения, найденная из эксперимента, с точностью до нескольких процентов согласуется с теоретическими предсказаниями, и лишь для тяжелых атомов обнаруживаются систематические отклонения. Однако расхождение между теорий и экспериментом и в этом случае вполне объяснимо, поскольку именно для тяжелых атомов пренебрежение величинами порядка δ становится недопустимым. Измерения Саундерса[35] над b-термом Пария хорошо согласуются со значением отношения $\Delta\nu_b^{12}/\Delta\nu_b^{23} = 1{,}33$, предсказываемым теорией.

Относительно абсолютных величин расстояний между линиями триплетов в спектрах элементов второй группы периодической системы можно заметить следующее. В грубом приближении можно считать, что орбита внешнего валентного электрона не претерпевает сколько-нибудь заметных изменений при переходе от щелочных к щелочноземельным элементам. Следовательно, приближенно можно положить

$$H_{i\,\text{щелочн}} \sim H_{i\,\text{щелочнозем}}.$$

Более заметные расхождения обнаружатся в тех случаях, когда в дублетном атоме внутреннюю часть еще можно будет считать очень малой, в то время как в триплетном атоме (из-за внутреннего валентного электрона) такое приближение окажется недостаточным.

Из (22) и (8а) следует, что расстояние между самым верхним и самым нижним уровнями триплетов щелочноземельных элементов приблизительно втрое больше, чем соответствующее расстояние между линиями дублета предшествующих им в периодической системе щелочных металлов. Эта зависимость также выполняется достаточно хорошо. Что же касается изменения расстояния между линиями триплетов с возрастанием порядкового номера элемента, то здесь применимы те же соображения, которые были развиты нами для случая дублетных систем.

В заключение относительно триплетных систем следовало бы заметить, что теоретические трудности, связанные с их интерпретацией, кое в чем превосходят те, с которыми мы сталкиваемся в случае дублетных систем. «Внутреннее квантовое число» нельзя более интерпретировать просто как полный момент импульса (такое истолкование внутреннего квантового числа справедливо лишь для простых линий и внутренних линий каждого триплета), оно служит своего рода параметром, нумерующим три возможных направления момента импульса атомного остова. Соответственно, правила отбора для n_J в случае триплетных систем могут быть понятыми лишь с точки зрения принципа соответствия. Лишь таким путем, как подчеркивалось при рассмотрении дублетов, удается прийти к удовлетворительному решению вопросов, связанных с интенсивностью линий.

В заключении мы хотели бы кратко затронуть вопрос о так называемых «несобственных дублетах», наблюдаемых, например, в спектре ортогелия. Напрашивается идея рассматривать их как дублеты «простых линий» с моментами импульса, распределенными между внешним и внутренним валентными электронами, как (см. с. 21) $(n - 1/2, -1/2)$ и $(n - 1/2, +1/2)$, поскольку причина, по которой мы пренебрегли

---

[34] *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien, 3. Aufl., Kap. 6, S. 455.

[35] *Saunders.* Astrophys. Journ., 1920, **51**, 23.

этой возможностью, для гелия ввиду отсутствия остова отпадает. Нормальный эффект Зеемана, в том виде, как он наблюдается у этого дублета, не требует никаких пояснений.

Чтобы упростить рассмотрение, сопоставим еще раз исходные и преобразованные значения тех квантовых чисел, которые встречаются в нашей задаче. Квантовое число, входящее в числитель формул серий, остается целым, и его надлежит рассматривать как сумму радиального квантового числа и квантового числа момента импульса для внешнего электрона. Последнее не совпадает с традиционным азимутальным квантовым числом n, а равно $n - 1/2$. Радиальное квантовое число принимает значения $(1/2, 3/2, \ldots)$. «Внутреннее» квантовое число n_J, принимающее различные значения для различных уровней во внутреннем магнитном поле, совпадает для дублетной системы с полным моментом импульса атома. В этом случае n можно интерпретировать как сумму абсолютных величин моментов импульса остова и внешнего электрона. В случае триплета зависимость между n_J и полным моментом импульса сложнее. Структура дублета (триплета) определяется внутренним магнитным числом m_i^* (соответственно m_i). Его можно интерпретировать как проекцию среднего момента импульса валентных электронов относительно оси магнитного поля, связанного с остовом. Магнитное квантовое число m^* (или m) задается проекцией среднего момента импульса валентных электронов относительно прямой, на которой лежит вектор поля **H**.

Выводы

В § 1 и § 4 были приняты простые допущения относительно дублетных и триплетных атомов, объясняющие кратность линий внутренними магнитными полями. В § 2 и § 5 исследовано поведение таких атомов во внешнем магнитном поле. Проведенное исследование позволяет интерпретировать всю совокупность данных по аномальному эффекту Зеемана в согласии с экспериментом и позволяет вывести формулу перехода к эффекту Пашена—Бака. Существенную физическую причину возникновения аномального эффекта Зеемана мы усматриваем в противоречии с классическим излучением (сферическими волнами). В § 3 и § 6 получены количественные выводы относительно расстояний между линиями дублетов и триплетов. В хорошем согласии с экспериментальными данными вычислено расщепление линии лития $\lambda = 6\,708$ Å. Получены формулы, описывающие убывание расщепления в ряду $(s, p, d, \ldots)$. Для отношения расстояний между линиями триплета $\Delta\nu^{12}/\Delta\nu^{23}$ выведена простая формула, передающая характер изменения этого отношения в ряду элементов: 2 : 1 для p-терма, 3 : 2 для d-терма и т. д.

В заключение я хотел бы выразить признательность моему высокочтимому учителю проф. Зоммерфельду, побудившему меня выполнить эту работу, за разностороннюю поддержку.

ИНТЕНСИВНОСТЬ РАСЩЕПЛЕННЫХ ЛИНИЙ И ИХ ЗЕЕМАНОВСКИХ КОМПОНЕНТ*

Совместно с А. Зоммерфельдом

Как известно, применяя принцип соответствия при анализе кинематических свойств атомных орбит, можно делать выводы об интенсивности спектральных линий, возникающих при изменении этих орбит. Кинематические свойства атомной орбиты качественно определяются характеризующими ее квантовыми числами. Задача об определении последних может теперь считаться решенной для больших групп спектральных линий, не только для простых, но и для расщепленных линий (дублетов, триплетов, вообще «мультиплетов»), а также для линий, расщепленных магнитным полем (аномальные зеемановские компоненты).

Для простых термов достаточно иметь два квантовых числа, а именно *главное квантовое число* n (мы применяем обозначения Бора), которое определяет номер орбиты для терма серии, и *азимутальное квантовое число* k, которым различаются между собой термы серии ($k = 1$: s-терм, $k = 2$: p-терм, $k = 3$: d-терм, $k = 4$: b-терм). Спектроскописты, располагая линии по сериям, еще до квантовой теории спектральных серий устанавливали, хотя и бессознательно, значения этих двух квантовых чисел. Для *расщепленных термов* дополнительно вводится *внутреннее квантовое число* j, которое различает между собой естественно расщепленные уровни одного терма, например, три уровня триплета. Для многих классов расщепленных термов внутреннее квантовое число сегодня также определено. Наконец, зеемановское расщепление, вызванное внешним магнитным полем, различается четвертым — *магнитным — квантовым числом* m; формальная теория, разработанная Ланде для зеемановских термов, определяет значение m внутри отдельно взятой картины зеемановского расщепления.

Указанные квантовые числа имеют следующий кинематический смысл: n характеризует (посредством содержащегося в n радиального кванта) *форму орбиты* внешнего электрона («оптического электрона»), причем равенству $n = k$ соответствует, коротко говоря, круговая орбита, а неравенству $n > k$ отвечает эллиптическая орбита с тем большим эксцентриситетом, чем больше $n - k$. С другой стороны, квантовое число k кинематически сопоставляется *обращению перигелия эллиптической орбиты* в ее плоскости. Нормаль к этой плоскости, вокруг которой перигелий обращается в своем поступательном движении, мы будем называть k-осью. Вследствие обращения перигелия орбита принимает форму *розетки*. Квантовое число j означает полный момент импульса мгновенного состояния атома. Ось этого момента мы будем называть j-осью. В общем случае она не совпадает с k-осью. Вокруг j-оси плоскость орбиты совершает вращение или прецессию («внутреннюю

---

* Die Intensität der Mehrfachlinien und ihrer Zeemankomponenten. (Mit *A. Sommerfeld*). — Zs. Phys., 1922, **11**, 131–154. *Перевод А. А. Сазыкина.*

прецессию») в соответствии с тем, что j означает момент импульса атома. Наконец, в целом движущаяся таким образом система совершает еще вращение вокруг направления силовых линий внешнего магнитного поля; это направление мы будем называть m-осью. Такая *«магнитная прецессия»* определяется квантовым числом m, и в простейшем случае она представляет собой *ларморовскую прецессию.*

Для частот обращения этих четырех движений, приходящихся на единицу времени, мы введем обозначения

$$\nu_n, \quad \nu_k, \quad \nu_j, \quad \nu_m.$$

Соответствующие угловые скорости, т. е. умноженные на 2π частоты обращения, мы будем обозначать символами

$$o_n, \quad o_k, \quad o_j, \quad o_m.$$

Они расположены здесь в порядке убывания величин, так что всегда $o_n \gg o_k$, $o_k \gg o_j$ и в общем случае также $o_j \gg o_m$. Если последнее условие в исключительно сильных полях нарушается, то появляются особенности (эффекты Пашена—Бака), к которым мы вернемся в § 3. В нашем собственном рассмотрении интенсивностей зеемановских линий в § 6 и § 7 мы ограничимся только слабыми полями, так что там будет выполняться условие $o_m \ll o_j$. Существующие в общем случае соотношения между величинами позволяют нам рассматривать каждое из этих движений как бесконечно медленное по сравнению со следующим движением, в соответствии с методом последовательных приближений по теории возмущений.

Заметим между прочим, что по общим правилам механики частоты обращения ν можно вычислить, дифференцируя орбитальную энергию по соответствующему квантовому числу. Поскольку, как было сказано выше, энергия термов как функций квантовых чисел во многих случаях определяется из опыта, частоты ν, а значит и связанные с ними равенством $o = 2\pi\nu$ угловые скорости o, можно считать известными. Однако их более точные значения в дальнейшем нам не потребуются.

Не потребуются нам и более точные представления об атомных орбитах, имеющих модельное происхождение; для дальнейшего изложения достаточным будет приведенное выше общее кинематическое описание. Мы имеем возможность применять одну и ту же схему для рассмотрения дублетных и триплетных систем (в более общем случае: четных и нечетных спектров), тогда как точная модельная теория при рассмотрении этих двух систем должна исходить из совершенно различных предпосылок. Поскольку вопросы интенсивности носят в основном качественный характер, наши результаты во многих случаях не будут зависеть от количественных деталей. Например, для нас несущественно, будем ли мы приравнивать момент импульса для спектральных серий прямо азимутальному квантовому числу k или же $k^* = k - 1/2$, как этого требует для дублетных систем магнитооптическая модель, предложенная Гейзенбергом.

§ 1
Общие сведения о движении и его Фурье-представлении

Строго говоря, при вычислении излучения атома в классической теории следовало бы рассматривать полный электрический момент, т. е. сумму координат всех электронов атома. Если же, несмотря на это, мы говорим лишь о координатах одного «внешнего» электрона, то только потому, что имеем в виду наблюдения в видимой части спектра. Движение других, внутренних и потому сильнее связанных электронов, относится к рентгеновским линиям по принципу соответствия таким образом, как движение внешнего электрона к видимым линиям. Поэтому нам,

по-видимому, можно ограничиться видимой областью спектра, оставив в стороне движение внутренних электронов.

Движение внешнего электрона мы будем считать в первом приближении плоским. В плоскости орбиты мы введем ортогональные координаты ξ, η. Если бы орбита была строго периодической, например, эллиптической, то при объединении ξ и η в комплексную переменную мы имели бы:

$$\xi + i\eta = \sum_{s=-\infty}^{s=+\infty} a_s e^{iso_n t}. \tag{1}$$

Целое число s представляет по принципу соответствия квантовые скачки Δn. Коэффициенты ряда Фурье a_s суть комплексные постоянные.

В действительности, в общем случае структуры атома орбита будет не строго периодической, и ее перигелий будет вращаться с угловой скоростью o_k. Можно предполагать, что возмущающие силы со стороны электронной оболочки малы по сравнению с притяжением к ядру, откуда следует (см. введение)

$$o_k \ll o_n.$$

Для возмущенного, как и для первоначального периодического, движения азимутальная координата является циклической, так что для нее справедлива теорема площадей. При дополнительном предположении о центральном характере возмущающих сил доказательство теоремы не представляет затруднений.

Но и без этого особого предположения цикличность азимута обеспечивается уже самим существованием азимутального квантового числа k; его введение обосновывается именно цикличностью азимута. Отсюда также следует равномерность вращения перигелия.

Соответственно этому вместо формулы (1) имеем

$$\xi + i\eta = e^{io_k t} \sum a_s e^{iso_n t}. \tag{2}$$

Перейдем от системы $\xi\eta$ к системе xyz. Осью z пусть будет «ось j», θ пусть означает угол между ней и нормалью к плоскости орбиты, т.е. нашей «осью k» (см. введение). Ось y мы направим по оси η. Тогда формулы преобразования будут гласить

$$x = \xi \cos\theta, \quad y = \eta, \quad z = \xi \sin\theta. \tag{3}$$

Отсюда следует

$$x + iy = \xi \cos\theta + i\eta. \tag{3а}$$

Теперь плоскость орбиты, т.е. плоскость $\xi\eta$, в системе xyz будет не закрепленной, а вращающейся вокруг оси z с угловой скоростью o_j («внутренняя прецессия»). Поэтому формула (3а) преобразуется к виду

$$x + iy = e^{io_j t}(\xi \cos\theta + i\eta). \tag{3б}$$

Мы предполагаем, что (см. введение)

$$o_j \ll o_k.$$

Это значит, что истинное возмущение мало отклоняется от центрального, и это сказывается в том, что расщепление в тонкой структуре линий (например, в дублетной или триплетной структуре), выраженное в волновых числах, будет мало по сравнению с разностью волновых чисел линий разных серий.

Поскольку j означает момент импульса всего атома (см. введение), для атома в отсутствие сил строго выполняется теорема площадей относительно оси j, в свою очередь, это оправдывает введение квантового числа j. Поэтому вращение вокруг оси j происходит равномерно, как указывает уравнение (3б). Если, с другой стороны, атом находится во внешнем силовом поле, например, магнитном, то все сказанное выше остается приближенно справедливым до тех пор, пока внешнее поле продолжает быть достаточно слабым по сравнению с возмущающими силами, влияющими на внутреннюю прецессию.

Отделяя в формуле (2) вещественную и мнимую часть, мы получаем

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1}{2}\left(\sum a_s e^{i(so_n+o_k)t} + \sum \bar{a}_s e^{-i(so_n+o_k)t}\right), \\ \eta &= \frac{1}{2i}\left(\sum a_s e^{i(so_n+o_k)t} - \sum \bar{a}_s e^{-i(so_n+o_k)t}\right). \end{aligned} \tag{4}$$

При этом $\bar{a}_s$ означает величину, комплексно сопряженную a_s. Подставляя значения (4) в формулы (3б) и (3), мы получаем сначала

$$\begin{aligned} x + iy &= e^{io_jt}\left\{\frac{\cos\theta + 1}{2}\sum a_s e^{i(so_n+o_k)t} + \frac{\cos\theta - 1}{2}\sum \bar{a}_s e^{-i(so_n+o_k)t}\right\}, \\ z &= \frac{\sin\theta}{2}\left\{\sum a_s e^{i(so_n+o_k)t} + \sum \bar{a}_s e^{-i(so_n+o_k)t}\right\}. \end{aligned} \tag{5}$$

Эти формулы можно для удобства записать в виде двойных сумм: первое суммирование производится по s в пределах от $-\infty$ до $+\infty$, причем мы используем равенство

$$\sum \bar{a}_s e^{-iso_nt} = \sum \bar{a}_{-s} e^{+iso_nt};$$

второе суммирование совершается по индексу r в сомножителе

$$e^{iro_kt},$$

причем индекс r принимает только два значения $r = \pm 1$. Вместо формул (5) мы теперь получаем

$$\begin{aligned} x + iy &= \sum_{-\infty}^{+\infty} s \sum_{-1}^{+1} r' \, c_{s,r} e^{i(so_n+ro_k+o_j)t}, \\ z &= \sum_{-\infty}^{+\infty} s \sum_{-1}^{+1} r' \, d_{s,r} e^{i(so_n+ro_k)t}. \end{aligned} \tag{6}$$

Знак $'$ во второй сумме указывает на то, что значение $r = 0$ следует исключать. Вновь введенные коэффициенты c и d, как показывает сравнение формул (5) и (6), имеют следующие значения:

$$\begin{aligned} c_{s,1} &= \frac{1+\cos\theta}{2} a_s, & c_{s,-1} &= -\frac{1-\cos\theta}{2} \bar{a}_{-s}, \\ d_{s,1} &= \frac{\sin\theta}{2} a_s, & d_{s,-1} &= \frac{\sin\theta}{2} \bar{a}_{-s}. \end{aligned} \tag{7}$$

Перейдем теперь к третьей системе координат, которую мы назовем XYZ. Осью Z пусть будет «ось m», т.е. направление магнитных силовых линий. Угол

между ней и осью j пусть будет Θ. Ось Y мы направим по оси y. Формулы преобразования теперь принимают вид

$$\begin{aligned} X &= x\cos\Theta - z\sin\Theta, \\ Y &= y, \\ Z &= x\sin\Theta + z\cos\Theta. \end{aligned} \tag{8}$$

Таким образом, сначала имеем

$$X + iY = x\cos\Theta + iy - z\sin\Theta. \tag{8а}$$

Рассмотрим теперь «магнитную прецессию», вследствие которой весь атом, в частности ось j, прецессирует с постоянной угловой скоростью o_m вокруг оси Z. Равномерность прецессии следует из однородности магнитного поля. Поэтому мы заменим формулу (8а) на

$$X + iY = e^{io_m t}(x\cos\Theta + iy - z\sin\Theta). \tag{8б}$$

Из первого уравнения (6), после того как мы отделим вещественную и мнимую часть, следует

$$\begin{aligned} x &= \frac{1}{2}\sum s\sum r'\left(c_{s,r}e^{i(so_n+ro_k+o_j)t} + \bar{c}_{s,r}e^{-i(so_n+ro_k+o_j)t}\right), \\ y &= \frac{1}{2i}\sum s\sum r'\left(c_{s,r}e^{i(so_n+ro_k+o_j)t} - \bar{c}_{s,r}e^{-i(so_n+ro_k+o_j)t}\right). \end{aligned}$$

Если мы подставим это и значение z из уравнений (6) в формулы (8б) и (8), то получим

$$\begin{aligned} X + iY = e^{io_m t}\Big\{ &\frac{1+\cos\Theta}{2}\sum s\sum{}' rc_{s,r}e^{i(so_n+ro_k+o_j)t} - \\ &- \frac{1-\cos\Theta}{2}\sum s\sum r'\bar{c}_{s,r}e^{-i(so_n+ro_k+o_j)t} - \sin\Theta\sum s\sum r'd_{s,r}e^{i(so_n+ro_k)t}\Big\}, \\ Z = \frac{\sin\Theta}{2}&\sum s\sum r'\left\{c_{s,r}e^{i(so_n+ro_k+o_j)t} + \bar{c}_{s,r}e^{-i(so_n+ro_k+o_j)t}\right\} + \\ &+ \cos\Theta\sum s\sum r'd_{s,r}e^{i(so_n+ro_k)t}. \end{aligned}$$

Упростим эти формулы, введя тройные суммирования, а именно кроме суммирований по s и r также суммирование по q. Именно, представим

$$e^{+io_j t}, \quad 1, \quad e^{-io_j t}$$

в виде

$$e^{iqo_j t}, \quad q = +1, 0, -1.$$

Соответственно этому мы можем написать

$$\begin{aligned} X + iY &= \sum_{-\infty}^{+\infty} s\sum_{-1}^{+1} r'\sum_{-1}^{+1} qC_{s,r,q}e^{i(so_n+ro_k+qo_j+o_m)t}, \\ Z &= \sum_{-\infty}^{+\infty} s\sum_{-1}^{+1} r'\sum_{-1}^{+1} qD_{s,r,q}e^{i(so_n+ro_k+qo_j)t}. \end{aligned} \tag{9}$$

Введенные здесь коэффициенты C и D имеют следующие значения

$$C_{s,r,q} = \frac{1+\cos\Theta}{2}c_{s,r}, \qquad C_{s,r,0} = -\sin\Theta d_{s,r}, \qquad C_{s,r,-1} = -\frac{1-\cos\Theta}{2}c_{-s,-r},$$
$$D_{s,r,1} = \frac{\sin\Theta}{2}c_{s,r}, \qquad D_{s,r,0} = \cos\Theta d_{s,r}, \qquad D_{s,r,-1} = \frac{\sin\Theta}{2}c_{-s,-r}. \tag{10}$$

Уравнения (6) и (7) дают в общем смысле решение задачи об интенсивности для структуры линий в отсутствие поля. Равным образом уравнения (9) и (10) содержат утверждения, которые можно делать относительно интенсивности в картинах магнитооптического расщепления.

§2
Правила отбора для квантовых чисел k, j, m

Хорошо известно, каким образом Бор получил из формулы (2) *правило отбора для азимутального квантового числа* k. В то время как для «n-движения» в формуле (2) имеются все обертоны, т. е. члены с показателями $iso_n t$, для «k-движения» остается только основное колебание с показателем $io_k t$. Поэтому, по принципу соответствия, главное квантовое число может изменяться на любые значения $\Delta n = s$, а связанные с ними изменения азимутального квантового числа *ограничены значениями* $\Delta k = \pm 1$. При этом значение $\Delta k = -1$ следует понимать в том смысле, что знаки перед i в правой и левой части формулы здесь должны стать противоположными.

К группам (pp') и (dd') в щелочноземельных металлах и к аналогичным группам в сложных спектрах, на первый взгляд составляющим исключение из этого правила отбора, мы вернемся в §4.

Точно таким же образом мы получим из формулы (6) *правило отбора для внутреннего квантового числа* j. Для j-движения в $x+iy$ или в комплексно сопряженную величину $x-iy$ входят экспоненты с показателями $\pm io_j t$, а по z j-движение вообще не происходит. То же самое мы скажем, если ограничим введенный в формуле (9) индекс q значениями $+1, 0, -1$. Из принципа соответствия теперь следует такое же ограничение для квантового скачка Δj: *он может принимать только значения* ± 1 и 0. Правило отбора для внутреннего квантового числа вместе с отличием его от правила отбора для азимутального квантового числа, найденное первоначально чисто эмпирическим путем из структуры линий побочной серии, становится теперь само собой разумеющимся по соображениям кинематики. Мы могли бы добавить к этому и *правило поляризации* (компонента $\Delta j = 0$ колеблется параллельно, компоненты $\Delta j = \pm 1$ колеблются перпендикулярно оси j), но проверить это при пространственно неопределенном в случае отсутствия поля положении оси j было бы невозможно.

Весьма поучительно, что нарушение правила отбора для внутреннего квантового числа, а именно реализация Пашеном и Баком запрещенных линий в сильном магнитном поле[1)], могло бы быть предсказано с помощью нашего уравнения (6), основанного на принципе соответствия. Как уже было отмечено в предыдущем параграфе при выводе этого уравнения, магнитное поле, которое нельзя считать слабым по сравнению с силами, вызывающими внутреннюю прецессию, будет нарушать равномерность этой прецессии. Но тогда в уравнении (6) наряду с экспонентами, содержащими в показателе $io_j t$, появятся общие дополнительные члены $iqo_j t$ с $q > 1$. По принципу соответствия тогда будут также возможны переходы при $\Delta j > 1$, т. е. правило отбора для j будет нарушено. Примечателен в этом отношении также наблюденный Пашена и Баком факт, что переход $\Delta j = 2$ реализуется легче, а именно при меньших магнитных полях, чем переход $\Delta j = 3$.

1) *Paschen F., Back E.* Zeemanjubiläumsheft. Physica, 1921, **1**, 261.

Бор указал на это еще в дополнении[2] к докладу в 1921 г. Позже он объяснил также причину того, что именно магнитное, а не электрическое, поле способно реализовать запрещенные линии. Электрический центр, т. е. средняя точка приложения электрической силы во время розеточного движения электрона в плоскости орбиты, совпадает с ядром. Таким образом, плечо электрической силы в среднем равно нулю; поэтому электрическая сила не создает вращательного момента и не изменяет положения плоскости орбиты — в противоположность магнитному полю, которое вызывает в первую очередь прецессию плоскости орбиты.

Мы приходим, наконец, к *правилу отбора для магнитного квантового числа* m, которое содержится в уравнениях (9). Поскольку частота o_m входит в них совершенно таким же образом, как частота o_j в уравнения (6), то и правило отбора для m формально совпадает с правилом отбора для j: *разрешаются только квантовые переходы с* $\Delta m = \pm 1$ и 0. Это правило также было прежде постулировано эмпирически в теории Ланде, относящейся к аномальным эффектам Зеемана; теперь же оно становится самоочевидным по кинематическим соображениям в духе принципа соответствия.

Однако при изменениях магнитного квантового числа m и внутреннего кванта j существует различие в *поляризации*: компоненты, принадлежащие переходу $\Delta m = 0$, поляризованы по оси Z, т. е. по направлению силовых линий, а компоненты, принадлежащие переходам $\Delta m \pm 1$, в поперечном эффекте поляризованы перпендикулярно силовым линиям, в продольном же эффекте поляризованы по кругу. Такая поляризация может быть хорошо доказана опытом, так как направление силовых линий в пространстве известно.

Имеется еще одно отличие между правилами отбора для m и j: первое выполняется строго даже в самых сильных магнитных полях, второе, как мы видели, в конце концов нарушается. В действительности, мы обосновали равномерность магнитной прецессии, из которой следует правило отбора для m, только однородностью магнитного поля (ср. переход от уравнения (8) и (8б)), а эта однородность при усилении магнитного поля сохраняется. Если бы мы захотели нарушить также магнитное правило отбора, то нам пришлось бы, в противоположность ситуации для j, прикладывать не магнитные, а электрические поля, например, перпендикулярно направлению однородного магнитного поля. Эти поля сделали бы прецессию неравномерной и поэтому реализовали бы переходы, соответствующие $\Delta m > 1$. Указания на такие переходы, как известно, имеются на сделанных Пашеном и Баком[3] в 1912 году снимках бальмеровских линий, на которых видны многочисленные магнитные линии.

§3

Дополнительные правила Ланде, запрещающие переходы $0 \to 0$ для внутреннего и магнитного квантового числа

В то время как переход $\Delta j = 0$ по правилу отбора для внутреннего квантового числа в общем случае разрешен, *он запрещен, если* $j = 0$. Это и есть первое из дополнительных правил Ланде. Второе гласит: *переход* $0 \to 0$ *по магнитному квантовому числу запрещен, если одновременно* $\Delta j = 0$ (при этом само число необязательно должно быть нулем).

Оба дополнительных запрета подтверждаются опытом, в частности, первым из них объясняется выпадение линии Sp_3 из спектра щелочноземельных металлов и аналогичных им элементов. Мы покажем, что эти запреты действительно следует ожидать из принципа соответствия.

---

[2] *Bohr N.* Zs. Phys., 1922, **9**, 27.

[3] *Paschen F., Back E.* Ann. Phys., 1912, **39**, 897, таблица VIII, рис. 4.

В первом случае полный момент атома j равен нулю как в начальном, так и в конечном состоянии. Следовательно, положение оси j совершенно не определено. Поэтому неопределенной будет и интенсивность линии, которая, как мы подробнее покажем в следующих параграфах, зависит от угла θ между осями j и k. То же самое можно сказать и о поляризации этого хотя и ненаблюдаемого, но физически обязанного существовать единичного процесса. Мы можем сказать вместе с Ланде: Вследствие условия $\Delta j = 0$ испущенный свет должен быть поляризован параллельно оси j. Но эта ось лишена физического смысла. Значит, испускание света также теряет физический смысл.

Что касается второго дополнительного запрета, то он получается в качестве особого случая при нашем общем расчете интенсивности зеемановских компонент в §6, — см. также §7, замечания по уравнению (20). Поэтому он представляет собой необходимое следствие принципа соответствия.

Мы уже подчеркивали особо эти запреты по следующей причине: запрет перехода $0 \to 0$ по внутреннему квантовому числу вместе с его объяснением по принципу соответствия несомненно показывает, что внутреннее квантовое число, как впервые обосновал Ланде, означает ***полный механический момент импульса*** атома. С другой стороны, если определить по методу Штерна и Герлаха магнитный момент в состоянии с известным j, то можно будет проверить, выполняется ли классическое соотношение между магнитным и механическим моментом. Такая проверка имеет решающее значение для современного развития атомной физики.

Другая причина, по которой дополнительный запрет перехода $0 \to 0$ имеет фундаментальное значение для внутреннего квантового числа, заключается в том, что этот запрет позволяет нормировать абсолютные значения числа j, которое иначе определялось бы лишь с точностью до аддитивной постоянной. Это можно показать на примере спектра хрома[4].

§4
Интенсивность естественных, магнитно не расщепленных структур линий

В общем случае интенсивности определяются в согласии с принципом соответствия как коэффициенты Фурье[5]. В простейшей форме коэффициенты Фурье содержатся в уравнении (2), где они имеют обозначение a_s. Они определяют меру для силы последовательных линий рассматриваемой серии. Для орбит, не проникающих во внутренние области атома и потому имеющих приближенно форму полных эллипсов, a_s можно было бы вычислять подобно тому, как Бессель вычислял аналогичные коэффициенты для планетарных орбит (происхождение бесселевых функций!), а Крамерс в своей диссертации — для водородных эллипсов. Однако нас эти коэффициенты здесь не интересуют, потому что (вследствие условий возбуждения) они не допускают хорошего сравнения с опытом. Наша проблема касается скорее отношения интенсивностей внутри некоторой группы линий, соответствующей при данном $\Delta n = s$ и данном Δk различным значениям Δj и j[6]. Коэффициенты

---

[4] *Gieseler.* Diss. Tübingen; *Sommerfeld A.* Ann. Phys., 1923, **70**, 32.

[5] При этом появляется трудность, характерная для принципа соответствия: следует ли рассматривать ряды Фурье для начального или конечного терма или же для некоторой усредненной промежуточной орбиты? Для нас решение этого вопроса не имеет значения, так как наши выводы, носящие более качественный характер, в основном одинаковы как для начальной, так и для конечной или промежуточной орбиты.

[6] Мы условимся понимать под Δ разность между начальным и конечным значением соответствующего квантового числа, приписывая таким образом убыванию квантового числа положительный знак. Поэтому главная серия (переход $p \to s$) соответствует разности $\Delta k = +1$, 2-я побочная серия (переход $s \to p$) имеет $\Delta k = -1$.

Фурье, которые при этом необходимо рассматривать, в уравнениях (6) и (7) имеют обозначения $c_{s,r}$ и $d_{s,r}$. Коэффициенты a_s, содержащиеся в уравнениях (7) в виде множителей, при вычислении отношения интенсивностей сокращаются.

Рассмотрим, во-первых, группу линий, удовлетворяющую обычному правилу отбора для k, и положим $\Delta k = +1$. В силу правил отбора для j мы должны различать три случая:

$$\Delta k = +1, \quad \begin{cases} \Delta j = +1, \\ \Delta j = 0, \\ \Delta j = -1. \end{cases}$$

Для дублетов последний переход отпадает; для составных триплетов и тем более для мультиплетов в сложных спектрах многократно появляются отдельные переходы, соответствующие различным значениям j (при постоянном Δj).

Коэффициенты Фурье, сопоставляемые двум первым переходам по принципу соответствия, можно взять прямо из уравнений (6) и (7). Следует положить $r = \Delta k = +1$, а значение $s = \Delta n$ оставить произвольным, используя для $\Delta j = +1$ первое, для $\Delta j = 0$ второе из уравнений (6). Тогда в соответствии с уравнениями (7) искомые коэффициенты примут вид

$$\begin{aligned} \Delta j = +1: \quad & c_{s,1} = \frac{1+\cos\theta}{2} a_s = \cos^2\frac{\theta}{2} a_s, \\ \Delta j = 0: \quad & d_{s,1} = \frac{\sin\theta}{2} a_s = \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} a_s. \end{aligned} \tag{11}$$

Для $\Delta j = -1$ следует найти коэффициенты при слагаемом Фурье

$$e^{i(so_n + o_k - o_j)t}.$$

Это слагаемое входит в первое из уравнений (6) при замене $+i$ на $-i$, $+s$ на $-s$ и значении $r = -1$. Поэтому с учетом значения $c_{s,-1}$ в уравнениях (7) соответствующий коэффициент будет

$$\bar{c}_{-s,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2} a_s.$$

Тем самым в завершение уравнений (11) получается

$$\Delta j = -1: \quad \bar{c}_{-s,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2} a_s = -\sin^2\frac{\theta}{2} a_s.$$

Для вычисления соответствующих этим трем колебаниям интенсивностей — назовем их J_{+1}, J_0 и J_{-1} — мы возьмем произвольное направление линии наблюдения w и дополним его двумя перпендикулярными к нему осями u, v. Таким образом, мы получим ортогональные системы координатных осей xyz и uvw, повернутые относительно друг друга на произвольный угол. Для вычисления, например, J_{+1} мы возьмем в нашем первом колебании компоненты x и y по u и v — компоненты по w в излучении не участвуют, — образуем

$$(x_u + y_u)^2 + (x_v + y_v)^2$$

и усредним по всем положениям u, v, w. Мы легко находим

$$J_{+1} = \frac{2}{3}|c_{s,1}|^2 = \frac{2}{3}\cos^4\frac{\theta}{2}|a_s|^2,$$

а также

$$J_{-1} = \frac{2}{3}|\bar{c}_{-s,-1}|^2 = \frac{2}{3}\sin^4\frac{\theta}{2}|a_s|^2.$$

При вычислении J_0 мы должны учесть, что во втором уравнении (6) два сопряженных члена

$$d_{s,1} = e^{i(so_n+o_k)t} + d_{-s,-1}e^{-i(so_n+o_k)t}$$

содержат одну и ту же частоту и потому приводятся к одному члену; далее, здесь необходимо еще образовать среднее по времени. Окончательно получаем

$$J_0 = \frac{1}{3}|2d_{s,1}|^2 = \frac{4}{3}\cos^2\frac{\theta}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}|a_s|^2.$$

Таким образом, отношение интенсивностей задается пропорцией

$$J_{+1} : J_0 : J_1' = \cos^4\frac{\theta}{2} : 2\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} : \sin^4\frac{\theta}{2}. \tag{12}$$

Следует, пожалуй, обратить внимание на то, что угол θ принимает в каждом из трех членов нашей пропорции свое собственное значение. Даже если речь идет о переходах с одного и того же начального уровня, конечные уровни будут различными. Тогда в качестве θ следует рассматривать угол между осями j и k в трех различающихся одно от другого промежуточных состояниях (см. начало этого параграфа). Совершенно аналогично обстоит дело для перехода на один и тот же конечный уровень.

Рассмотрим, во-вторых, переход $\Delta k = -1$ для трех случаев

$$\Delta k = -1, \quad \begin{cases} \Delta j = -1, \\ \Delta j = 0, \\ \Delta j = +1. \end{cases}$$

Коэффициенты Фурье для первых двух случаев следует брать из уравнений (6), полагая $r = 1$ и заменяя $+i$, $+s$ на $-i$, $-s$:

$$\bar{c}_{-s,1} = \frac{1+\cos\theta}{2}\bar{a}_{-s}, \qquad \bar{d}_{-s,1} = \frac{\sin\theta}{2}\bar{a}_{-s}.$$

Третий коэффициент Фурье мы получаем из уравнений (6), полагая $r = -1$ и заменяя s на $-s$:

$$c_{-s,-1} = -\frac{1-\cos\theta}{2}\bar{a}_{-s}.$$

Отсюда для усредненных интенсивностей имеем

$$J_{-1} : J_0 : J_{-1} = \cos^4\frac{\theta}{2} : 2\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2} : \sin^4\frac{\theta}{2}. \tag{13}$$

Следует обратить внимание на то, что по сравнению с формулой (12) члены пропорции (13) здесь расположены в обратном порядке.

В-третьих, мы рассмотрим переход $\Delta k = 0$, противоречащий правилу отбора для азимутального квантового числа. Он наблюдается в спектрах Ca и Sr для комбинаций (pp') и (dd'), для которых формальное объяснение было дано Р. Гётце по методу внутреннего квантового числа, а углубленное модельное объяснение, как мы узнали из устного сообщения, было получено И. Франком на основе новой модели атома Бора. В спектрах Mn и Cr также имеются аналогичные, но более усложненные структуры.

Два таких терма, как np, np', при равном азимутальном квантовом числе и приблизительно одинаковой орбите внешнего электрона различаются, очевидно, строением атомного остова. Поэтому здесь мы должны рассматривать кроме внешнего электрона еще один внутренний электрон атома, разлагая его движение в ряд Фурье. Тогда в уравнении (2) появятся дополнительные члены, которые не могут быть написаны без некоторого произвола. Поскольку орбиты внешнего и внутреннего электронов располагаются в разных плоскостях, к уравнению для величины $\xi + i\eta$ (которую теперь следует представить в виде $\sum \xi + i \sum \eta$) добавится перпендикулярная плоскости $\xi\eta$ ζ-компонента движения, обусловленная частично орбитой внутреннего электрона, частично связью между внутренним и внешним электронами.

Некоторые соображения (усреднение по розетке внешнего электрона, различие между колебаниями, которые принадлежат внутреннему электрону как таковому и после отделения внешнего электрона приводят к искровому спектру, и колебаниями, которые становятся возможными только при участии внешнего электрона) заставляют нас предположить, что главными в разложении будут не содержащие o_k члены по ζ-компоненте. Пусть их коэффициент Фурье будет b. Совершая преобразование (3), теперь с учетом ζ-компоненты, мы получаем коэффициенты главных членов нашего разложения (6) для $x + iy$ и z в виде

$$\begin{aligned} \Delta j &= \pm 1: \qquad c = b\cos\theta, \\ \Delta j &= 0: \qquad d = b\sin\theta. \end{aligned} \tag{14}$$

Отсюда для интенсивностей J_0, J_{+1}, J_{-1} трех переходов

$$\Delta k = 0, \quad \begin{cases} \Delta j = 0, \\ \Delta j = +1, \\ \Delta j = -1 \end{cases}$$

получается пропорция

$$J_0 : J_{+1} : J_{-1} = 2\cos^2\theta : \sin^2\theta : \sin^2\theta. \tag{15}$$

Мы опять изменили порядок следования по сравнению с (12) и (13), всегда оставляя на первом месте наибольшую интенсивность (в предположении малости угла θ, которое еще следует обсудить). Таким образом, мы формулируем следующее *правило интенсивностей.*

Самыми сильными будут те переходы по внутреннему квантовому числу, которые происходят параллельно с переходами по азимутальному квантовому числу (равнонаправленные переходы); интенсивность становится тем слабее, чем сильнее отличается направленность одного перехода от направленности второго (более или менее разнонаправленные переходы).

Это правило уже было выведено ранее из эмпирических данных по интенсивностям[7]. Тот факт, что оно является следствием из полученных выше формул, будет показан в следующих параграфах.

§5
Проверка правила интенсивностей на опыте

Наши формулы для интенсивностей (12), (13) и (15) дают ясное распределение их по величине, когда угол θ мал (правильнее сказать: «углы θ малы», ибо каждый

[7] *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl. Braunschweig, 1922. S. 447. — Русский перевод: *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектры. М., Гостехиздат, 1956.

переход имеет свой собственный угол θ). В этом случае правые части формул (12), (13) и (15) принимают вид

$$1 : \frac{1}{2}\theta^2 : \theta^4 \quad \text{или} \quad 1 : \frac{1}{2}\theta^2 : \frac{1}{2}\theta^2. \tag{16}$$

Таким образом, возникает вопрос, когда угол θ, т. е. наклон оси j относительно оси k, становится малым. Полный момент импульса складывается (и притом в общем случае векторно!) из момента невозбужденного атома (j_0) и момента возбуждения (j_1)[8]. Последний по существу равен азимутальному квантовому числу k. Следовательно, если число k будет большим по сравнению с j_0, то k образует главную составную часть j, и ось j почти совпадает с осью k.

I. *Мы ожидаем, следовательно, что наше правило интенсивностей выполняется более отчетливо для термов с большим числом k — для d-, b-, … термов, но при малом k оно, наоборот, проявляется меньше.* Мы сейчас увидим, что этот вывод полностью подтверждается на опыте.

Угол θ становится малым также и в том случае, когда условие $k \gg j_0$ хотя и не выполняется, но j_0 и j_1 (или k) складываются *алгебраически*, а не векторно. Это имеет место для основного уровня каждого терма и для уровня с наибольшим внутренним квантовым числом, который вместе с тем — по крайней мере в обычных дублетных и триплетных системах — в общем случае является самым высшим уровнем, отвечающим наибольшему значению терма.

II. *Мы ожидаем, следовательно, что наше правило интенсивностей оправдывается для различных уровней терма неодинаково, лучше всего для уровня с наибольшим j, а при меньших j оно начинает терять силу.* Это также подтверждается опытом.

а) *Триплеты,* $\Delta k = \pm 1$. Проверим наше утверждение I сначала для триплетных систем. Для комбинаций (pd) 1-й побочной серии Ca, например $2p$–$4d$, мы находим в справочнике Кайзера следующие данные об интенсивностях (10 — сильная интенсивность, 0 — слабая):

$$J_{+1} : J_0 : J_{-1} = 10 : 8 : 4.$$

Здесь мы имеем хорошо известную структуру составного триплета. Переход $\Delta j = +1$ встречается трижды, а именно между термами[9] $d_3 \to p_2$, $d_2 \to p_1$, $d_1 \to p_0$. Это дает «главные линии» структуры общей интенсивностью 10. Переход $\Delta j = 0$ встречается дважды, именно при $d_2 \to p_2$ и $d_1 \to p_1$. При этом получаются «сателлиты первого порядка», и оба они имеют меньшую интенсивность 8. Переход $\Delta j = -1$ дает «сателлит второго порядка», имеющий наименьшую интенсивность. Поскольку в 1-й побочной серии $\Delta k = +1$, главные линии соответствуют равнонаправленным,

[8] Когда невозбужденному состоянию атома отвечает s-орбита ($k = 1$), следовало бы полагать $j_1 = k - 1$. Это имеет место в действительности в триплетных системах (в более общем случае — в «нечетных системах»). Напротив, для дублетных систем (вообще для «четных систем») кажется естественным полагать $j_1 = k^* = k - 1/2$. См. по этому поводу цитированную работу Зоммерфельда (*Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl.). Эти различия, очевидно, несущественны для нашего более качественного рассмотрения интенсивностей.

[9] Мы обозначаем здесь термы, добавляя к ним индекс, равный внутреннему квантовому числу, и хотя это обозначение не совпадает с обычным, мы хотели бы рекомендовать его для общего применения. Тогда вместо обычно обозначаемых термов d_1, d_2, d_3 мы получим d_3, d_2, d_1; вместо прежних p_1, p_2, p_3 мы напишем p_2, p_1, p_0. В новых обозначениях линии D_1, D_2 принадлежат термам p_1, p_2, а не p_2, p_1, как раньше. При этом способе обозначений индексы, ранее имевшие чисто условный характер, приобретают важное физическое значение и позволяют получать непосредственно представление о возможных комбинациях.

а сателлиты противоположно направленным переходам, причем направление изменений k и j для сателлита второго порядка больше, чем для сателлитов первого порядка. Таким образом, наше правило интенсивностей впервые теоретически объясняет противоположность между сателлитом и главной линией.

Интенсивности триплетной серии Бергмана, к сожалению, не измерены. В соответствии с (1) мы ожидаем, что здесь различие между главными линиями и сателлитами будет выражено еще сильнее, чем в 1-й побочной серии, потому что азимутальное квантовое число начального и конечного терма здесь на 1 больше, чем там.

Мы возвращаемся к главной серии и 2-й побочной серии, т. е. к комбинациям (sp). Здесь следует прежде всего заметить, что градация по интенсивности в главной серии для триплетных линий $p_2 \to s$, $p_1 \to s$ и $p_0 \to s$, $\Delta k = +1$, будет такой же, как во 2-й побочной серии для (обращенных) линий $s \to p_2$, $s \to p_1$, $s \to p_0$, $\Delta k = -1$. Это непосредственно следует из нашего правила о равнонаправленных и разнонаправленных переходах, согласно которому интенсивности зависят не от самого направления перехода по j, а только от его соотношения с направлением перехода по k. Мы сошлемся также на уравнения (12) (главная серия, $\Delta k = +1$) и (13) (2-я побочная серия, $\Delta k = -1$), которые воспроизводят оба эти ряда по интенсивностям в соответственно обратном порядке по квантовым переходам Δj.

Для численных значений мы находим у Кайзера, например, для Ca $2p \to 1s$ (2-я побочная серия):

$$J_{-1} : J_0 : J_{+1} = 10 : 10 : 8.$$

Фогт приводит в качестве типичного значения для эффекта Зеемана в кислороде 3 : 3 : 2. Это незначительное убывание интенсивности полностью соответствует утверждению I, принимая во внимание малые начальные и конечные значения k.

б) *Дублеты*, $\Delta k = \pm 1$. Из дублетов щелочных металлов мы выберем дублет Cs, разделенный самым широким промежутком. В данных Кайзера для главной и 2-й побочной серии имеются колебания как взаимные, так и в зависимости от номера члена (см. также исследования Фюхтбауэра и Рождественского). Для 1-й побочной серии мы находим, например, следующие данные:

$$J_1 : J_0 = 9 : 6 \quad 2p\text{–}5d$$
$$8 : 2 \quad 2p\text{–}6d, \quad 2p\text{–}7d.$$

Наиболее характерные данные К. Майснера[10] о бергмановских сателлитах C_s:

$$J_1 : J_0 = 10 : 2 \quad 3d\text{–}5b, \quad 3d\text{–}6b.$$

Здесь, как и в предыдущих пропорциях, первое число относится к двум главным линиям $b_4 \to d_3$ и $b_3 \to d_2$ составного дублета, второе — к единственно существующим сателлитам $b_3 \to d_2$. Полагая по предыдущему примеру с $D_2 : D_1$ соответствующее отношение интенсивностей для главной серии равным приблизительно 2 : 1, мы получаем для масштаба уменьшения угла θ и для оценки справедливости нашего утверждения (1) шкалу:

2 : 1	4 : 1	5 : 1
главная серия	1-я побочная серия	серия Бергмана

в) *Мультиплеты*, $\Delta k = \pm 1$. Утверждение II мы можем проверять только на «мультиплетах» запутанных спектров Cr и Mn, потому что только там имеется необходимое количество сравниваемых и полностью идентифицированных уровней

[10] *Meissner K. W.* Ann. Phys., 1921, **65**, 378.

в термах, когда как, например, для составных триплетов только один триплет является полным, а два других — оборванными. Сопоставление линий и данные по интенсивностям мы возьмем из работы Каталана [11], объяснение и обозначения [12] линий соответствуют цитированной работе Зоммерфельда.

Из спектра Cr мы рассмотрим мультиплет типа (PD) при λ от 525 до 541 нм и типа (DB) при λ от 388 до 394 нм. Данные в таблице расположены так, чтобы из них можно было видеть структуру групп линий, соответствующую правилу отбора для внутреннего квантового числа

	D_4		D_3		D_2		D_1		D_0
P_3	8	:	6	:	4				
P_2			7	:	7	:	6		
P_1					5	:	6	:	6

	B_5		B_4		B_3		B_2		B_1
D_4	40	:	20	:	6				
D_3			25	:	20	:	6		
D_2					20	:	20	:	6
D_1							20	:	15
D_0									12

Наиболее выражен спад интенсивности для $J_{+1} : J_0 : J_{-1}$, как мы ожидали согласно утверждению II, в верхней строке схемы (DB); он постепенно ослабляется при переходе к нижним строкам. В верхней строке схемы (PD) спад интенсивности также выражен отчетливо, хотя, в соответствии с утверждением I, не так сильно, как в схеме (DB); в нижних строках схемы (PD) он постепенно исчезает, пока не начинает происходить в обратном порядке.

Приведем еще соответствующие схемы для Mn. Здесь для внутренних квантовых чисел известны не абсолютные, а только относительные значения. Поэтому мы введем для индексов обозначение x, $x+1$ и т. д. Противоположное обозначение p, d; D, B обосновывается наличием интеркомбинационных линий между двумя системами термов, аналогичных соответствующим линиям в спектре щелочноземельных металлов.

	d_{x+3}		d_{x+2}		d_{x+1}		d_x		d_{x-1}
p_{x+2}	10	:	9	:	7				
p_{x+1}			$8\frac{1}{2}$	:	8	:	$7\frac{1}{2}$		
p_x					$7\frac{1}{2}$	:	8	:	8

	B_{x+3}		B_{x+2}		B_{x+1}		B_x		B_{x-1}		B_{x-2}		B_{x-3}
D_{x+2}	10	:	3	:	1								
D_{x+1}			9	:	6	:	2						
D_x					8	:	5	:	2				
D_{x-1}							5	:	6	:	2		
D_{x-2}									4	:	4	:	2

[11] *Catalan M. A.* Philos. Trans., 1922, **223**, 127.

[12] С тем различием, что индексы термов там записываются в обычном тогда порядке, а здесь соответствуют внутренним квантовым числам.

Весьма характерным здесь является сильно выраженный спад интенсивности в верхней строке схемы (DB), постепенно ослабляющийся при переходе вниз по строкам. То же самое происходит в схеме (pd), но в более слабой степени, как это должно быть в соответствии с утверждением I.

г) *Щелочноземельные металлы, хром, марганец*, $\Delta k = 0$. Перейдем теперь к комбинациям (pp'), (dd'), $\Delta k = 0$ в спектрах щелочноземельных металлов. Равнонаправленными здесь являются переходы $\Delta j = 0$, стоящие на диагонали нашей схемы; переходы $\Delta j = \pm 1$ в одинаковой степени различаются по направлению. Для вторых переходов интенсивности должны быть, по нашим ожиданиям, одинаковыми, но ослабленными, для первых — более сильными. Различие в интенсивностях между первыми и вторыми переходами должно быть, соответственно утверждению I, выраженным сильнее для переходов (dd'), чем для (pp'), и кроме того, по утверждению II, в верхних строках должно быть более ясным, чем в нижних. Все это действительно подтверждают две следующие схемы, взятые из работы Гётце[13]:

	p_2	p_1	p_0
p'_2	20	15	
p'_1	15	15	15
p'_0		15	—

	d_3	d_2	d_1
d'_3	20	8	
d'_2	8	15	8
d'_1		8	10

Соответствующие схемы для Cr и Mn при λ от 388 до 394 нм и от 402 до 483 нм приводятся ниже.

	D_4	D_3	D_2	D_1	D_0
D'_4	12	8			
D'_3	10	10	10		
D'_2		10	6	8	
D'_1			9	5	7
D'_0				6	–

	D_{x+2}	D_{x+1}	D_x	D_{x-1}	D_{x-2}
D'_{x+2}	10	6			
D'_{x+1}	8	8	6		
D'_x		5	4	6	
D'_{x-1}			4	2	6
D'_{x-2}				2	2

Здесь мы также замечаем большую интенсивность переходов для $\Delta j = 0$ по сравнению с $\Delta j = \pm 1$, по крайней мере в верхних строках, приблизительное равенство интенсивностей переходов для $\Delta j = +1$ и $\Delta j = -1$. Запрет перехода $0 \to 0$, послуживший в спектре Cr основанием для абсолютного определения j, в схеме для Cr и в схеме (pp') для щелочноземельных металлов обозначен прочерком.

§ 6
Интенсивность зеемановских компонент

По принципу соответствия интенсивности зеемановских компонент определяются в уравнении (9) коэффициентами $C_{s,r,q}$ и $D_{s,r,q}$, описывающими движение внешнего электрона в системе XYZ (ось Z = оси m = направлению магнитных силовых линий). В то время как аналогичные рассуждения в § 4 относились к случаям $\Delta k = +1, -1, 0$, теперь мы должны различать случаи $\Delta j = +1, -1, 0$; если ранее в каждом случае рассматривались изменения Δj, то теперь мы будем рассматривать изменения магнитного квантового числа Δm.

[13] *Götze R.* Ann. Phys., 1921, **66**, 285. Переходы (pp') для Ca образуют фраунгоферову группу G, λ от 428 до 432 нм, для Sr — группу λ от 427 до 488 нм. В каждом из переходов (dd') для Ca, Sr и Ba наблюдалось одинаковое распределение интенсивностей. Обращаем внимание также на то, что линия $0 \to 0$ в случае переходов (pp') и (DD') выпадает.

Итак, сначала мы рассмотрим случай

$$\Delta j = +1, \quad \begin{cases} \Delta m = +1, \\ \Delta m = 0, \\ \Delta m = -1. \end{cases}$$

Переход $\Delta j = +1$, $\Delta m = +1$ при произвольных изменениях квантовых чисел n и k в соответствии с первым из уравнений (9) характеризуется коэффициентом Фурье $C_{s,r,+1}$, переход $\Delta j = +1$ в соответствии с вторым из уравнений (9) определяется коэффициентом $D_{s,r,+1}$. В случае $\Delta j = +1$, $\Delta m = -1$ мы должны заменить в первом уравнении (9) $+i, +s, +r$ на $-i, -s, -r$ и, соответственно, положить $q = -1$. Для этого случая член ряда Фурье имеет вид

$$\overline{C}_{-s,-r,-1} e^{i(so_n + ro_k + o_j - o_m)t}.$$

Три рассматриваемых здесь коэффициента Фурье в соответствии с уравнениями (10) приобретают вид

$$C_{s,r,+1} = \frac{1+\cos\Theta}{2} c_{s,r}, \quad D_{s,r,+1} = \frac{\sin\Theta}{2} c_{s,r}, \quad \overline{C}_{-s,-r,-1} = -\frac{1-\cos\Theta}{2} c_{s,r}.$$

Для интенсивностей мы введем соответствующие величинам Δm обозначения J_{+1}, J_0, J_{-1}; мы должны приравнять их квадратам абсолютных величин трех только что написанных коэффициентов, добавив множитель 4 при J_0 (усреднение по пространству здесь отпадает, так как положение оси Z в атоме определено физически; усреднение по времени остается). Итак,

$$J_{+1} : J_0 : J_{-1} = \frac{1}{4}(1+\cos\Theta)^2 : \sin^2\Theta : \frac{1}{4}(1-\cos\Theta)^2. \tag{17}$$

Мы не ввели здесь, как в аналогичном уравнении (12), половинный угол, потому что это привело бы в дальнейшем к некоторым неудобствам.

Во-вторых, рассмотрим (причем перечисление частных случаев здесь будет делаться в обратном порядке) переходы

$$\Delta j = -1, \quad \begin{cases} \Delta m = -1, \\ \Delta m = 0, \\ \Delta m = +1. \end{cases}$$

В соответствии с уравнениями (9) коэффициент Фурье для первого частного случая будет $\overline{C}_{-s,-r,+1}$, для второго $D_{s,r,-1}$, для третьего $C_{s,r,-1}$. В соответствии с уравнениями (10) имеем

$$\overline{C}_{-s,-r,+1} = \frac{1+\cos\Theta}{2} \bar{c}_{-s,-r}, \quad D_{s,r,-1} = \frac{\sin\Theta}{2} \bar{c}_{-s,-r}, \quad C_{s,r,-1} = -\frac{1-\cos\Theta}{2} \bar{c}_{-s,-r}.$$

Таким образом, для отношения интенсивностей получаем

$$J_{-1} : J_0 : J_{+1} = \frac{1}{4}(1+\cos\Theta)^2 : \sin^2\Theta : \frac{1}{4}(1-\cos\Theta)^2. \tag{18}$$

Остаются еще случаи

$$\Delta j = 0, \quad \begin{cases} \Delta m = 0, \\ \Delta m = +1, \\ \Delta m = -1. \end{cases}$$

Теперь коэффициенты Фурье в соответствии с уравнениями (9) и (10) будут иметь вид

$$D_{s,r,0} = \cos\Theta d_{s,r}, \quad C_{s,r,0} = -\sin\Theta d_{s,r}, \quad \bar{C}_{-s,-r,0} = -\sin\Theta \bar{d}_{-s,-r}.$$

Поскольку в уравнении (16) z вещественная переменная, коэффициенты d должны быть мнимыми сопряженными, т. е. $d_{-s,-r} = \bar{d}_{s,r}$, или также $\bar{d}_{-s,-r} = d_{s,r}$. Отсюда мы получаем соотношение интенсивностей

$$J_0 : J_{+1} : J_{-1} = \cos^2\Theta : \frac{1}{4}\sin^2\Theta : \frac{1}{4}\sin^2\Theta. \tag{19}$$

Аналогично тому, что было указано в §4 для θ, угол Θ здесь и в предшествующих пропорциях также принимает свое собственное значение для каждого из рассматриваемых переходов.

§7

Графическое изображение зеемановских компонент и сравнение с опытом

Прежде всего мы завершим выбор угла Θ, причем в отличие от угла θ в §5 здесь нельзя ограничиваться малыми значениями. Как мы знаем, Θ означает угол между осями m и j. Если бы мы имели дело с простыми соотношениями водородной модели и их пространственным квантованием, то следовало бы положить

$$\cos\Theta = \frac{m}{j}. \tag{20}$$

В основе этого соотношения лежит представление о том, что магнитное число m означает проекцию полного момента j на направление магнитных силовых линий, представление, которое вообще подкрепляется эмпирически подтвержденным условием $|m| \leqslant j$ (см. теорию Ланде для аномальных эффектов Зеемана). До какой степени уравнение (20) соответствует действительности, можно определить только путем детального рассмотрения модели атома. Ниже мы будем в основном придерживаться уравнения (20). Только при малых значениях j, когда Θ особенно сильно влияет на результаты вычислений, мы будем вводить в уравнение (20) поправки в духе магнитооптической модели, предложенной Гейзенбергом.

Теперь мы дадим обоснование дополнительного запрета для магнитного квантового числа из §3. Он гласит, что переход $0 \to 0$ запрещен по m, если $\Delta j = 0$. Из формулы (20) мы видим, что при переходе $0 \to 0$ $\cos\Theta = 0$, $\sin\Theta = 1$ и притом как для начальной, так и для конечной орбиты, а также и для любой промежуточной орбиты. Но тогда из уравнения (19) при $\Delta j = 0$ следует

$$J_0 : J_{\pm 1} = 0 : \frac{1}{4}.$$

Таким образом, действительно имеем $J_0=0$, что и требовалось доказать.

Следующие схемы получены так, что определенные указанным образом отдельно для каждого перехода значения Θ были подставлены в формулы для интенсивности (17), (18), (19) предыдущего параграфа. В заключение из полученных таким способом интенсивностей было образовано арифметическое среднее и изображено на схеме отрезком соответствующей длины. Вид поляризации обозначен тем, что σ-компоненты (поляризованные перпендикулярно силовым линиям) изображены сплошной линией, π-компоненты (поляризованные параллельно силовым линиям) — пунктиром.

Величина нормального расщепления $\Delta\nu_n$ изображена на первой фигуре каждой группы, так что расщепление каждой компоненты можно измерять долями $\Delta\nu_n$. В соответствии с правилом поляризации σ-компоненты возникают при переходах $\Delta m = \pm 1$, и притом со стороны коротких или длинных волн при $\Delta m = +1$ или $\Delta m = -1$; π-компоненты отвечают переходу $\Delta m = 0$ и также располагаются симметрично относительно середины картины расщепления. Начальные значения m, из которых происходят переходы с Δm, указаны на схеме у верхнего конца отрезков интенсивности. То обстоятельство, что для дублетов эти значения являются полуцелыми, соответствует нумерации магнитных уровней Ланда и тем самым также эмпирическим картинам расщепления. Модельные представления при этом не учитываются. Числа на нижнем конце отрезков интенсивности означают эмпирические значения интенсивности, определенные Баком из его снимков и любезно предоставленные нам. Согласие их с теоретическими значениями интенсивности, изображенными длиной отрезка, в общем оказывается очень хорошим.

Примечательно, что как эмпирическая, так и теоретическая полная интенсивность в общем случае больше для σ-компонент, чем для π-компонент. Это замечательное следствие принципа соответствия было замечено для аномального эффекта Зеемана еще в диссертации Крамерса. Мы подтверждаем здесь на основании данных Бака, что оно может быть вполне реальным, как недавно предполагал и Бор.

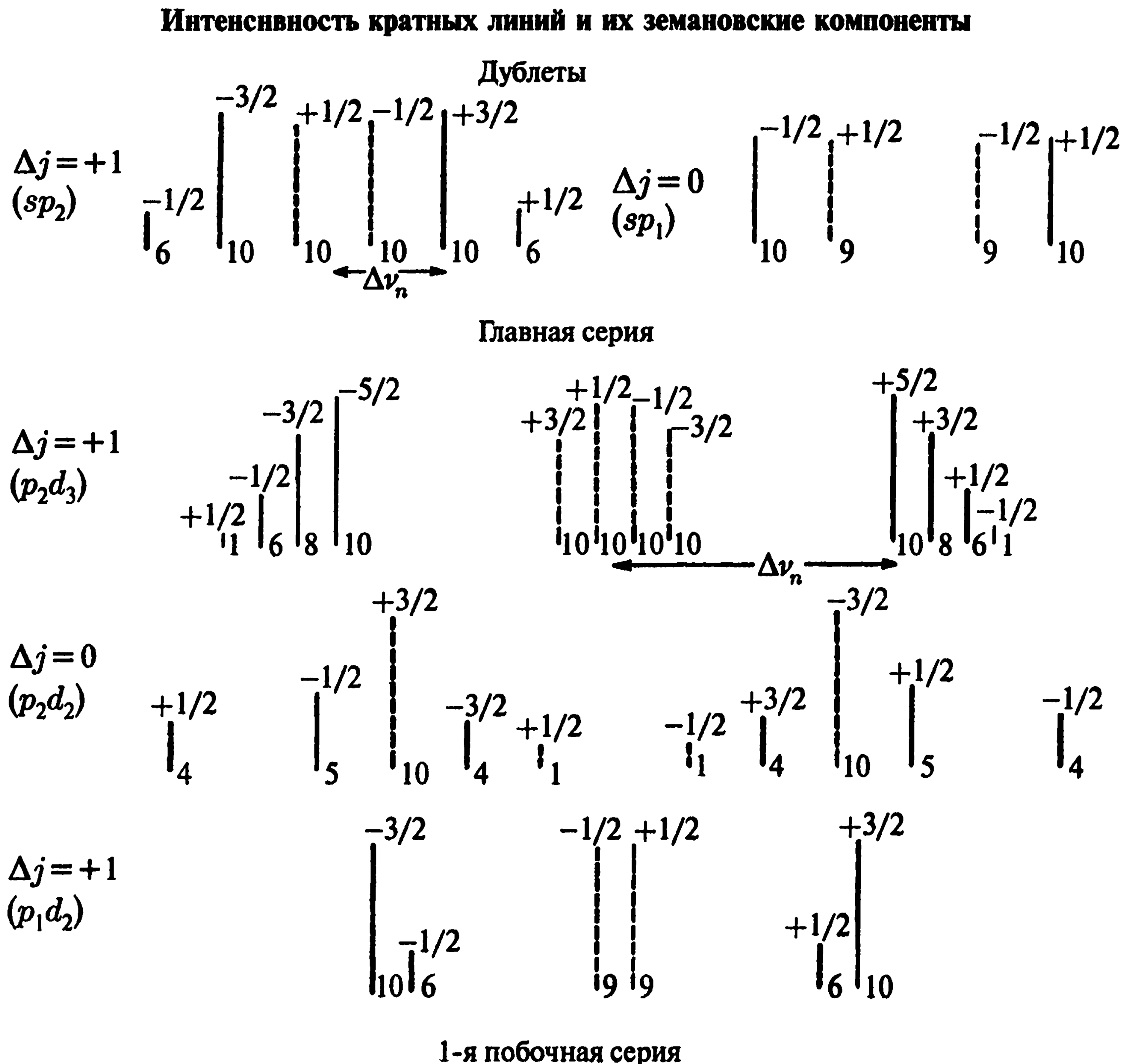


Рис. 1

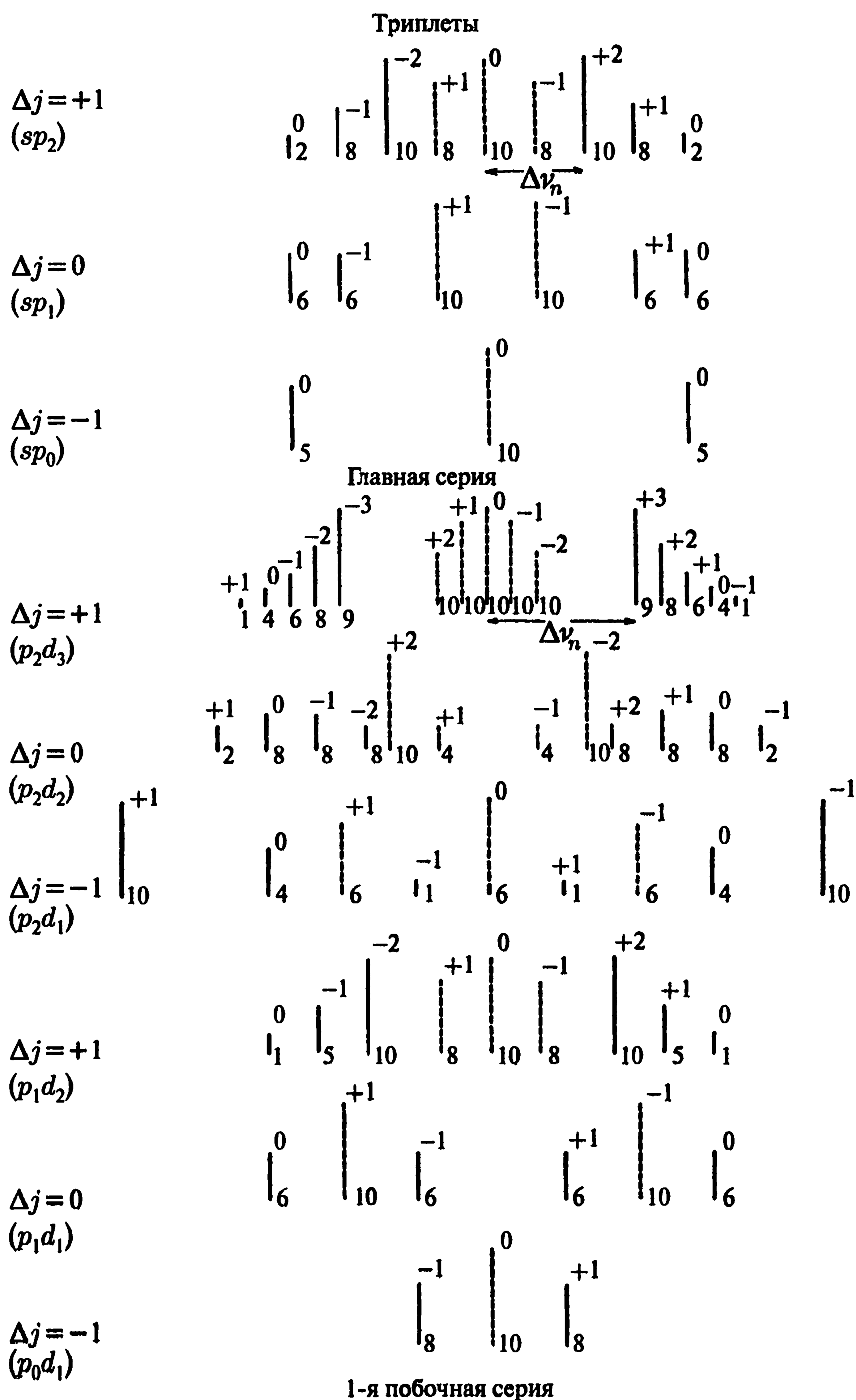


Рис. 2

В целом мы можем сказать, что в применении и к рассмотренным здесь вопросам интенсивности принцип соответствия отлично подтверждается как при спонтанных расщеплениях термов в отсутствие поля, так и при собственно зеемановских расщеплениях. В общем качественный характер этих вопросов позволили нам обойтись без более детальных представлений о строении атома, что укрепляет достоверность наших выводов.

К КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ МОЛЕКУЛ*

Совместно с М. Борном

ВВЕДЕНИЕ

При применении квантовой теории к молекулам можно различать следующие ступени развития. На первой ступени[1] двухатомная молекула заменяется моделью в виде гантели, которая рассматривается как простой «ротатор». Многоатомные молекулы, соответственно, рассматриваются как твердые «волчки»[2]. Такие представления позволяют объяснить простейшие закономерности в области полосатых спектров и теплоемкости многоатомных газов. На следующей ступени предположение о жестких связях между атомами отвергается и рассматриваются колебания ядер, вначале гармонические; при этом, как показано Шпонером[3] и Кратцером[4], проявляются взаимосвязи между отдельными полосами внутри одной системы полос. На третьей ступени[5] учитывается взаимодействие между вращением и колебаниями ядер; вместе с тем принимается во внимание то, что колебания не совсем гармонические. Благодаря этому объясняются более тонкие закономерности, касающиеся расстояний между линиями одной полосы и последовательностями полос. При этих исследованиях рассматриваются в основном только движения ядер, тогда как электроны, которые при своем обращении вокруг ядер удерживают их вместе, остаются вне рассмотрения; квантовые переходы между орбитами электронов учитываются формально, путем простого прибавления энергии электронов, причем константы в энергии движения ядер (моменты инерции, колебательные числа) считаются теоретически неопределенными функциями электронных квантовых чисел. На четвертой ступени теории[6] к рассмотрению привлекается по крайней мере одно свойство движения электронов, а именно существование у электронов вращательного момента того порядка величины, как вращательный момент при движении ядер; Кратцер, Паули и Крамерс показали, что это обстоятельство существенно влияет на движение волчка, а Кратцер предпринял попытку объяснить воздействием момента импульса электрона появление дублетных линий в некоторых полосах.

На пятой и последней ступени теории молекула рассматривается как система ядер и электронов. Для двухатомной молекулы эта точка зрения проводится в последних работах Кратцера. Мы попытаемся здесь решить в совершенно общем виде задачу: какие движения совершает молекула как механическая система ядер и электронов, и в какой мере учитываются эти движения в обычной теории полос.

---

* Zur Quantentheorie der Molekeln. (Mit *M. Born*). — Ann. Phys., 1924, **4**, 1–31. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Schwarzschild K.* Berl. Akad. Ber., 1916, 548; *Bjerrum N.* Nernst—Festschrift, 1912, 90.

[2] *Heurlinger T.* Zs. Phys., 1919, **20**, 188; Zs. Phys., 1920, **1**, 82; *Lenz W.* Verh. Deutsch. Phys. Ges., 1919, **21**, 632.

[3] *Sponer H.* Diss. Göttingen 1920; Jahrb. Phil. Fak., 1921, 153.

[4] *Kratzer A.* Zs. Phys., 1920, **3**, 289; 1923, **16**, 353; Zs. Phys., 1921, **22**, 552; Ann. Phys., 1922, **67**, 127; 1913, **71**, 72; Sitzber. Bayr. Akad., 1922, 107; Naturwiss., 1913, **11**, 577.

[5] *Kratzer A.* Op. cit.; далее *Born M., Hückel E.* Zs. Phys., 1923, **24**, 1.

[6] *Kratzer A.* Op. cit.; далее *Kramers H.A.* Zs. Phys., 1923, **13**, 343, *Kramers H.A., Pauli W. jun.* Zs. Phys., 1923, **13**, 351.

В качестве главного отличительного признака молекул мы будем рассматривать тот факт, что масса ядра очень велика по сравнению с массой электрона. Затем, исходя из требуемого квантовой теорией допущения о том, что все импульсы и моменты импульса имеют одинаковый порядок величины, мы приведем доказательство того, что все перечисленные выше ступени теории полос в общем и целом соответствуют естественному ряду последовательных приближений, к которому мы приходим при разложении энергии по степеням квадратного корня из отношения массы электрона к массе ядра. В качестве вспомогательного математического аппарата мы будем применять теорию возмущений[7)]; однако рассматриваемый нами случай отличается тем, что обычный метод определения вековых возмущений оказывается непригодным, потому что среднее значение функции возмущения первого порядка тождественно обращается в нуль. Поэтому, прежде чем перейти к собственно теории молекул (§ 2), мы проведем исследование применяемых далее положений теории возмущений (§ 1).

Глава I
ВСПОМОГАТЕЛЬНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Пусть невозмущенная система будет условно периодической и строго интегрируемой путем разделения переменных. При этом из f степеней свободы $f-s$ степеней предполагаются вырожденными; число s называется, по Бору, степенью периодичности системы. Мы будем считать, что индексы пробегают следующие значения:

$$\begin{array}{lll} k, l, \ldots & \text{от } 1 & \text{до } f, \\ \alpha, \beta, \gamma, \ldots & \text{от } 1 & \text{до } s, \\ \rho, \sigma, \tau, \ldots & \text{от } s+1 & \text{до } f. \end{array}$$

Всегда можно сделать так, что функция Гамильтона невозмущенной системы будет зависеть только от переменных действия j_α^0 $(\alpha = 1, 2, \ldots, s)$:

$$H_0 = H_0(j_1^0, \ldots j_s^0). \tag{1}$$

Тогда степени свободы $s+1$ будут вырождены, т. е. угловые переменные w_ρ^0 $(\rho = s+1, \ldots, f)$ невозмущенной системы будут постоянными.

Пусть функция возмущения может быть разложена в ряд по параметру λ; полная функция Гамильтона пусть будет

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \ldots . \tag{2}$$

Здесь $H_1, H_2, \ldots$ зависят от всех переменных j_k^0, w_k^0 $(k = 1, \ldots, f)$.

Обычный метод теории возмущений состоит в том, что сначала снимается вырождение переменных j_ρ^0, w_ρ^0 путем вычисления вековых возмущений из дифференциального уравнения

$$\overline{H}_1 = E_1;$$

при этом черта означает усреднение по переменным $w_1^0, w_2^0, \ldots, w_s^0$.

Но теперь мы предположим, что это среднее значение тождественно равно нулю по переменным j_s^0, w_s^0:

$$\overline{H}_1 = E_1 = 0. \tag{3}$$

[7)] *Epstein P.* Zs. Phys., 1922, **8**, 211, 305, 9, 92, *Born M., Pauli W.* Zs. Phys., 1922, **10**, 137; *Born M., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1923, **14**, 44; *Nordheim L.* Zs. Phys., 1923, **17**, 316; 1924, **21**, 242.

Тем самым обычный метод определения вековых возмущений становится неприменимым, и возникает задача решить уравнения движения для этого случая.

Теперь представляется естественным определить движение для переменных j_ρ^0, w_ρ^0 с помощью $\overline{H}_2$; однако сразу это не получается, так как H_1 не обращается тождественно в нуль относительно w_α^0, j_α^0 и снова входит во все следующие приближения. Поэтому дополнительное введение в H_1 определенных с помощью $\overline{H}_2$ преобразованных угловых переменных и переменных действия j_ρ, w_ρ, соответствующих j_ρ^0, w_ρ^0, и использование их в дальнейших вычислениях оказывается невозможным.

Напротив, первый наш шаг будет состоять в том, что мы полностью избавимся от H_1.

Для этого служит каноническое преобразование

$$(w_k^0\, j_k^0) \to (w_k\, j_k)$$

с производящей функцией

$$F = \sum_k w_k^0 j_k + \lambda F_1(w_1^0, w_2^0, \dots j_1, j_2, \dots). \tag{4}$$

Оно определяется, следовательно, формулами

$$w_k = \frac{\partial F}{\partial j_k} = w_k^0 + \lambda \frac{\partial F_1}{\partial j_k}, \tag{4а}$$

$$j_k^0 = \frac{\partial F}{\partial w_k^0} = j_k + \lambda \frac{\partial F_1}{\partial w_k^0}. \tag{4б}$$

Теперь, сохраняя w_k^0 в каждом члене H (2), мы заменим переменные j_k^0 на j_k по формулам (4б); затем, снова проводя упорядочение по степеням λ, мы получим

$$H = H_0^* + \lambda H_1^* + \lambda^2 H_2^* + \dots, \tag{5}$$

где

$$H_0^* = H_0(j_1, j_2, \dots j_s), \tag{5а}$$

$$H_1^* = \sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha} \frac{\partial F_1}{\partial w_\alpha^0} + H_1, \tag{5б}$$

$$H_2^* = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{s} \frac{\partial^2 H_0}{\partial j_\alpha \partial j_\beta} \frac{\partial F_1}{\partial w_\alpha^0} \frac{\partial F_1}{\partial w_\beta^0} + \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial H_1}{\partial j_k} \frac{\partial F_1}{\partial w_k^0} + H_2, \tag{5в}$$

$$H_3^* = \frac{1}{3} \sum_{\alpha,\beta,\gamma=1}^{s} \frac{\partial^3 H_0}{\partial j_\alpha \partial j_\beta \partial j_\gamma} \frac{\partial F_1}{\partial w_\alpha^0} \frac{\partial F_1}{\partial w_\beta^0} \frac{\partial F_1}{\partial w_\gamma^0} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^{f} \frac{\partial^2 H_1}{\partial j_k \partial j_l} \frac{\partial F_1}{\partial w_k^0} \frac{\partial F_1}{\partial w_l^0} + \sum_{k=1}^{f} \frac{\partial H_2}{\partial j_k} \frac{\partial F_1}{\partial w_k^0} + H_3, \tag{5г}$$

Поскольку по предположению $\overline{H}_1 = 0$, F_1 как периодическую функцию переменных w_α^0 (содержащую, впрочем, также переменные j_α, w_σ^0, j_ρ) можно определить из дифференциального уравнения (с точностью до аддитивной произвольной

функции переменных w_ρ^0, j_ρ, j_α)

$$H_1^* = \sum_{\alpha=1}^{s} \frac{\partial H_0}{j_\alpha} \frac{\partial F_1}{\partial w_\alpha^0} + H_1 = 0. \tag{6}$$

После этого мы получаем

$$H = H_0^* + \lambda^2 H_2^* + \lambda^3 H_3^* + \ldots, \tag{5'}$$

где $H_2^*, H_3^*, \ldots$ суть однозначно определяемые из (5в,г,...) функции переменных w_k^0, j_k.

Но так как эти переменные не являются канонически сопряженными, то вместо w_k^0 мы должны ввести w_k с помощью уравнений (4а). Разрешая эти уравнения относительно w_k^0, мы легко получаем следующий ряд

$$w_k^0 = w_k - \lambda \frac{\partial F_1}{\partial j_k} + \lambda^2 \sum_l \frac{\partial^2 F_1}{\partial j_k \partial w_l} \frac{F_1}{j_l} + \ldots . \tag{7}$$

Подставляя этот ряд в (5′) и снова разлагая по λ, мы получаем

$$H = H_0 + \lambda^2 H_2 + \lambda^3 H_3 + \ldots, \tag{8}$$

где

$$H_0 = H_0(j_1, j_2, \ldots j_s), \tag{8а}$$

$$H_1 = H_2^*(w_1, w_2, \ldots, w_f, j_1, j_2, \ldots, j_f), \tag{8б}$$

$$H_3 = H_3^* - \sum_k \frac{\partial^2 H_2^*}{\partial w_k} \frac{\partial F_1}{\partial j_k}, \tag{8в}$$

$$H_4 = H_4^* - \sum_k \frac{\partial H_3^*}{\partial w_k} \frac{\partial F_1}{j_k} + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \left\{ \frac{\partial^2 H_2^*}{\partial w_k \partial w_l} \frac{\partial F_1}{\partial j_k} \frac{\partial F_1}{\partial j_l} + \right.$$
$$\left. + \frac{\partial H_2^*}{\partial w_k} \frac{\partial^2 F_1}{\partial j_k \partial w_l} \frac{\partial F_1}{\partial j_l} + \frac{\partial H_2^*}{\partial w_l} \frac{\partial^2 F_1}{\partial j_l \partial w_k} \frac{\partial F_1}{\partial j_k} \right\}, \tag{8г}$$

....

В формулах (8) все коэффициенты $H_0, H_2, H_3, \ldots$ суть функции сопряженных величин $j_1, w_1; j_2, w_2; \ldots j_f, w_f$ (H_0 зависит только от $j_1, j_2, \ldots j_f$). Вырожденные переменные w_ρ, j_ρ ($\rho = s+1, \ldots f$) теперь можно определить по методу вековых возмущений из уравнения

$$\overline{H}_2 = E_2,$$

где черта означает усреднение по переменным w_α. Мы предположим, что это уравнение может быть решено разделением переменных; тогда можно совершить такое каноническое преобразование

$$(w_\rho, j_\rho) \to (W_\rho J_\rho),$$

что переменные w_ρ, j_ρ станут периодическими по отношению к W_ρ (с периодом 1) и что $\overline{H}_2$ перейдет в функцию переменных J_ρ (которая, естественно, содержит также j_α):

$$H_2 = E_2(j_1, \ldots j_s, J_{s+1}, \ldots J_f). \tag{9}$$

В дальнейшем усреднение по w_α будет обозначаться одной чертой, а усреднение по w_α и w_ρ — двумя чертами. Пусть теперь в $H_2, H_3 \ldots$ вместо переменных w_ρ, j_ρ будут везде введены переменные W_ρ, J_ρ. Определим каноническое преобразование

$$(j_\alpha w_\alpha J_\rho W_\rho) \to (j_\alpha^* w_\alpha^* J_\rho^* W_\rho^*)$$

с помощью производящей функции

$$F = \sum_{\alpha=1}^{s} j_\alpha^* w_\alpha + \sum_{\rho=s+1}^{f} J_\rho^* W_\rho + \lambda F_1(j_\alpha^*, w_\alpha, J_\rho^*, W_\rho) + \lambda^2 F_2(j_\alpha^*, w_\alpha, J_\rho^*, W_\rho) + \ldots. \quad (10)$$

Таким образом, имеем

$$j_\alpha = \frac{\partial F}{\partial w_\alpha}, \quad w_\alpha^* = \frac{\partial F}{\partial j_\alpha^*}; \quad J_\rho = \frac{\partial F}{\partial W_\rho}, \quad W_\rho^* = \frac{\partial F}{\partial J_\rho}. \quad (10a)$$

Затем мы получаем следующий ряд приближенных уравнений

$$\sum_\alpha \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha^*} \frac{\partial F_1}{\partial w_\alpha} = 0. \quad (11a)$$

Отсюда $F_1 = G_1(W_\rho, J_\rho^*, j_\alpha^*)$, где G_1 означает пока произвольную функцию указанных аргументов; далее, имеем

$$\sum_\alpha \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha^*} \frac{\partial F_2}{\partial w_\alpha} + H_2 = E_2, \quad (11б)$$

$$\sum_\alpha \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha^*} \frac{\partial F_3}{\partial w_\alpha} + \sum_\rho \frac{\partial H_2}{\partial J_\rho^*} \frac{\partial F_1}{\partial W_\rho} + H_3 = E_3, \quad (11в)$$

$$\sum_\alpha \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha^*} \frac{\partial F_4}{\partial w_\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 H_0}{\partial j_\alpha^* \partial j_\beta^*} \frac{\partial F_2}{\partial w_\alpha} \frac{\partial F_2}{\partial w_\beta} + \sum_\alpha \frac{\partial H_2}{\partial j_\alpha^*} \frac{\partial F_2}{\partial w_\alpha} +$$
$$+ \sum_\rho \frac{\partial H_3}{\partial J_\rho^*} \frac{\partial F_2}{\partial W_\rho} + \frac{1}{2} \sum_{\rho,\sigma} \frac{\partial H_2}{\partial J_\rho^* \partial J_\sigma^*} \frac{\partial F_1}{\partial W_\rho} \frac{\partial F_1}{\partial W_\sigma} + \sum_\rho \frac{\partial H_3}{\partial J_\rho^*} \frac{\partial F_1}{\partial W_\rho} + H_4 = E_4, \quad (11г)$$

....

Усреднение уравнения (11б) по w_α снова приводит к формуле (9). Поэтому уравнение (11б) можно проинтегрировать и получить решение

$$F_2 = F_2^0(w_\alpha, j_\alpha^*, W_\rho, J_\rho^*) + G_2(W_\rho, J_\rho^*, j_\alpha^*). \quad (12б)$$

Здесь F_2^0 означает известную, периодическую относительно переменных w_α, W_ρ, а G_2 — снова произвольную функцию. При усреднении (11в) по W_ρ получается уравнение для определения G_1:

$$\sum_\rho \frac{\partial E}{\partial J_\rho^*} \frac{\partial G_1}{\partial W_\rho} + \overline{\overline{H}}_3 = E_3. \quad (13a)$$

Усредняя по W_ρ, мы получаем сначала

$$\sum^{\partial} \overline{\overline{H}}_3 = E_3.$$

Теперь уравнение (13а) можно проинтегрировать и тем самым определить функцию G_1. Но тогда интегрируется и уравнение (11в) с результатом

$$F_3 = F_3^0(w_\alpha, j_\alpha^*, W_\rho, J_\rho^*) + G_3(W_\rho, J_\rho^*, j_\alpha^*), \qquad (12\text{в})$$

где F_3^0 — известная, G_3 — произвольная функция.

Усреднение (11г) по w_α приводит к уравнению

$$\sum_\rho \frac{\partial E_2}{\partial J_\rho^*}\frac{\partial G_2}{\partial W_\rho} + \overline{\Phi}_4 = E_4, \qquad (13\text{б})$$

где введено сокращенное обозначение

$$\overline{\Phi}_4 = \frac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta}\frac{\partial^2 H_0}{\partial j_\alpha^* \partial j_\beta^*}\overline{\frac{\partial F_2^0}{\partial w_\alpha}\frac{\partial F_2^0}{\partial w_\beta}} + \frac{1}{2}\sum_{\rho,\sigma}\frac{\partial^2 E_2}{\partial J_\rho^* \partial J_\sigma^*}\frac{\partial G_1}{\partial W_\rho}\frac{\partial G_1}{\partial W_\sigma} + \sum_\rho \frac{\overline{\partial H_3}}{\partial_\rho^*}\frac{\partial G_1}{\partial W_\rho} + \overline{H}_4. \qquad (14)$$

Итак, мы имеем

$$\overline{\Phi}_4 = E_4, \qquad (15)$$

и F_4 приобретает вид

$$F_4 = F_4^0(w_\alpha, j_\alpha^*; W_\rho, J_\rho^*) + G_4(W_\rho, J_\rho^*, j_\alpha^*),$$

где F_4^0 — известная, G_4 — произвольная функция. Совершенно таким же образом мы можем, очевидно, продолжать процесс решения неограниченно. Именно, G_3 определяется в пятом, G_4 — в шестом приближении и т. д.

Для энергии мы получаем ряд следующего вида

$$H = E = E_0 + \lambda^2 E_2 + \lambda^3 E_3 + \ldots,$$

где $E_0 = H_0$ зависит от переменных $j_1^*, \ldots j_s^*$, а $E_2, E_3, \ldots$ суть функции переменных $j_1^*, \ldots j_s^*, J_{s+1}^*, \ldots J_f^*$.

Метод становится неприменимым, если среднее значение $\overline{H}_2$ тождественно обращается в нуль для переменных w_ρ, j_ρ $(\rho = s+1, \ldots, f)$. Тогда весь процесс необходимо повторить еще раз. Сначала с помощью соответствующего канонического преобразования следует полностью устранить H_2 из ряда (8), так что он примет вид

$$H = H_0 + \lambda^3 H_3 + \lambda^4 H_4 + \ldots .$$

Потом следует проделать совершенно аналогичное примененному выше (10) разложение канонического преобразования, после чего мы получим разложение энергии в ряд вида

$$H = E = E_0 + \lambda^3 E_3 + \ldots,$$

исключая случай, когда $\overline{H}_3$ снова тождественно обращается в нуль. В этом случае процесс следует повторить еще раз и т. д.

Глава II

МЕХАНИКА МОЛЕКУЛ

§ 1

Обозначения и определения

Молекула представляет собой систему масс, состоящую из ядер и электронов, удерживаемых вместе действующими между ними электростатическими силами.

Массы ядер M_k велики по сравнению с массой электронов; мы положим $M_k = m_k/\lambda^2$, где λ — параметр, по порядку величины равный $\sqrt{\mu/M_0}$, μ — масса электрона, M_0 — масса ядра водорода. Тогда m_k будут по порядку величины такими же, как μ.

Задача, которая будет рассматриваться дальше, состоит в том, чтобы определить все свойства молекул, вытекающие из этого соотношения между порядками величин. Мы будем обозначать малыми буквами все величины, относящиеся к электронам, и большими буквами величины, относящиеся к ядрам, а именно:

	Электроны	Ядра
Число	n	N
Масса	μ	$M_\rho = m_\rho/\lambda^2$
Радиус-вектор	r_α	$\mathfrak{R}_\rho$
Скорость	$u_\alpha = \dot{r}_\alpha$	$U_\rho = \dot{\mathfrak{R}}_\rho$

Далее мы раз и навсегда условимся обозначать индексы следующим образом:

Электроны	Ядра
$\alpha, \beta, \gamma, \ldots$	$\rho, \sigma, \tau, \ldots$

Поскольку молекула в стационарном состоянии должна быть устойчивой системой, то должны существовать некоторые жестко связанные между собой точки $\mathfrak{R}_\rho^0$, от которых ядра при движении молекулы никогда сильно не удаляются. Поэтому по аналогии с теорией осциллятора (двухатомная молекула) мы положим для движения ядер

$$\mathfrak{R}_\rho = \mathfrak{R}_\rho^0 + \lambda \mathfrak{R}_\rho^{(1)}, \tag{1}$$

причем переменные $\mathfrak{R}_\rho^{(1)}$ по порядку величины имеют такие же значения, как $\mathfrak{R}_\rho^0$.

В дальнейшем мы будем всегда предполагать, что не все точки $\mathfrak{R}_\rho^0$ лежат на одной прямой; тем самым мы исключаем из рассмотрения частный случай двухатомных молекул. Обсуждение важного частного случая прямолинейных молекул будет проведено в особой статье. Далее, мы ограничим изучаемые нами явления требованием, чтобы все импульсы и моменты импульсов имели одинаковый порядок величины, а именно — чтобы они были пропорциональны нулевой степени λ. Это необходимо для того, чтобы было можно применять квантовую теорию, согласно которой эти величины с точностью до численных множителей равны постоянной Планка h.

Теперь мы введем жестко связанную с точками $\mathfrak{R}_\rho^0$ систему координат Σ со следующими обозначениями:

	Электроны	Ядра
Координаты	$x_\alpha, y_\beta, z_\alpha$	X_ρ, Y_ρ, Z_ρ
Компонент скоростей	$u_{\alpha x} = \dot{x}_\alpha, \ldots$	$U_{\rho x} = \dot{X}_\rho, \ldots$

Система Σ в общем случае будет двигаться в пространстве.

Наряду с этим мы будем использовать неподвижную систему координат $\overline{\Sigma}$, обозначая чертой сверху все отнесенные к ней величины. Взаимное расположение двух систем Σ, $\overline{\Sigma}$ можно описать шестью параметрами. Три из них представляют собой координаты начала системы Σ относительно $\overline{\Sigma}$; переносная скорость системы Σ относительно $\overline{\Sigma}$ будет обозначаться через $\mathfrak{b}$. Три других параметра определяют ориентацию (например, эйлеровы углы); не производя пока определенного выбора этих параметров, мы введем для них обозначения φ_1, φ_2, φ_3. Вектор мгновенной

угловой скорости системы Σ относительно $\overline{\Sigma}$ пусть будет $\mathfrak{s}$. Его компоненты в системе Σ суть линейные функции производных φ_k по времени[8]:

$$\mathfrak{s}_x = \sum_{k=1}^{3} a_{xk}\dot{\varphi}_k. \tag{2а}$$

Решение этих уравнений имеет вид

$$\dot{\varphi}_k = \sum_x b_{kx}\mathfrak{s}_x. \tag{2б}$$

Относительные скорости электронов и ядер в системе Σ, u_α и U_ρ, связаны с абсолютными скоростями $\bar{u}_\alpha$, $\overline{U}_\rho$ следующим образом

$$\bar{u}_\alpha = u_\alpha + \mathfrak{b} + [\mathfrak{s}r_\alpha], \tag{3а}$$

$$\overline{U}_\rho = U_\rho + \mathfrak{b} + [\mathfrak{s}R_\rho]. \tag{3б}$$

Кинетическая энергия электронов имеет вид

$$T^{(E)} = \frac{\mu}{2}\sum_\alpha \bar{u}_\alpha^2. \tag{4а}$$

Кинетическая энергия ядер будет

$$T^{(k)} = \frac{1}{2}\sum_\rho M_\rho \overline{U}_\rho^2 = \frac{1}{\lambda^2}\frac{1}{2}\sum_\rho m_\rho \overline{U}_\rho^2. \tag{4б}$$

Потенциальная энергия имеет вид

$$U = \frac{e^2}{2}\left\{\sum_{\alpha,\beta}{}' \frac{1}{|r_\alpha - r_\beta|}\right\} + \sum_{\rho,\sigma}{}' \frac{Z_\rho Z_\sigma}{|\mathfrak{R}_\rho - \mathfrak{R}_\sigma|} - 2\sum_{\alpha,\rho}\frac{Z_\rho}{|r_\alpha - \mathfrak{R}_\rho|}, \tag{5}$$

где Z_ρ означает порядковый номер ядра ρ.

§2

Дополнительные координаты и дополнительные условия

Поскольку по нашим предположениям ядра лишь немного удаляются из жестко связанных положений равновесия $\mathfrak{R}_\rho^0$, естественно ввести в качестве равноправных неизвестных шесть параметров, определяющих соответствующее этим положениям твердое тело, наряду с относительными координатами ядер и электронов; тогда, разумеется, необходимо наложить шесть дополнительных условий, чтобы сохранить число степеней свободы. Эти дополнительные условия мы выберем таким образом, чтобы подвижная система координат Σ с покоящимися в ней точками $\mathfrak{R}_\rho^0$ как можно лучше соответствовала истинному движению ядер.

Относительные положения точек $\mathfrak{R}_\rho^0$ мы будем сначала считать произвольными, но жестко фиксированными; дополнительно затем окажется, что существует лишь конечное число положений, в которых движение ядер имеет характер малых

[8] Мы применяем здесь и в дальнейшем обозначения x, y, z также в качестве индексов, пробегающих три направления координат; так, например, мы пишем $\operatorname{div}\mathfrak{U} = \sum_x \mathfrak{U}_x$ и т.д. (см. *Born M.* Atomtheorie des festen Zustandes. Leipzig, 1923).

колебаний вокруг этих положений, как того требует наше предположение (1). Ориентацию системы координат Σ по отношению к $\mathfrak{R}_\rho^0$ мы также будем считать сначала произвольной; удобно выбрать ее таким образом, чтобы начало координат находилось в центре тяжести, а оси координат совпадали с главными осями инерции системы ядер, покоящейся относительно $\mathfrak{R}_\rho^0$. Тогда имеем

$$\sum_\rho m_\rho \mathfrak{R}_\rho^0 = 0, \tag{6а}$$

$$\sum_\rho m_\rho Y_\rho^0 Z_\rho^0 = 0, \quad \sum_\rho Z_\rho^0 X_\rho^0 = 0, \quad \sum_\rho m_\rho X_\rho^0 Y_\rho^0 = 0. \tag{6б}$$

После того, как мы определим таким образом систему координат Σ по отношению к $\mathfrak{R}_\rho^0$, можно выбрать шесть упомянутых дополнительных условий, обеспечивающих совпадение ее движения с движением ядер. Выбор условий остается, естественно, до известной степени произвольным и определяется только соображениями целесообразности. Мы нашли, что предпочтительно выбрать следующие дополнительные условия:

$$\sum_\rho m_\rho \mathfrak{R}_\rho^{(1)} = 0, \tag{7а}$$

$$\sum_\rho m_\rho [\mathfrak{R}_\rho^0 \mathfrak{R}_\rho^1] = 0. \tag{7б}$$

Первое условие, очевидно, означает, что центр тяжести должен всегда оставаться в начале координат системы Σ. Смысл второго условия проясняется, если мы продифференцируем его по времени; в соответствии с уравнение (1) $U_\rho = \lambda \dot{\mathfrak{R}}_\rho^{(1)}$, и потому мы имеем:

$$\sum_\rho m_\rho U_\rho = 0, \tag{8а}$$

$$\sum_\rho m_\rho [\mathfrak{R}_\rho^0 U_\rho] = 0. \tag{8б}$$

В левой части второго уравнения мы имеем момент импульса ядер в системе Σ при их положениях в $\mathfrak{R}_\rho^0$; таким образом, мы требуем, чтобы момент импульса обращался в нуль, когда ядра проходят с любыми скоростями через положения равновесия $\mathfrak{R}_\rho^0$ [9].

Теперь мы должны еще выбрать, в какой форме мы будем использовать дополнительные условия при составлении уравнений движения — первоначальной (7) или же в продифференцированной (8). Предпочтительным кажется выбрать последнюю форму (8), потому что она позволяет применять метод интегрирования Гамильтона—Якоби особенно простым образом, как мы немедленно увидим.

В отсутствие дополнительных условий функция Лагранжа (подынтегральная функция в принципе Гамильтона) имела бы вид

$$L = T^{(E)} + T^{(K)} - U. \tag{9}$$

[9] Естественно, казалось бы, вместо (8) требовать, чтобы относительный момент импульса обращался в нуль каждое мгновение:

$$\sum_\rho m_\rho [\mathfrak{R}_\rho W_\rho] = 0.$$

Однако это условие не линейно по смещениям и их производным по времени; поэтому впоследствии оно оказывается неудобным.

К ней мы должны прибавить дополнительные условия с неопределенными множителями; эти шесть множителей мы можем рассматривать как компоненты двух векторов, которые мы будем обозначать через $\mathfrak{U}$, $\mathfrak{B}$. Тогда обобщенная функция Лагранжа приобретет вид

$$L^* = L + \mathfrak{U}\sum_\rho m_\rho U_\rho + \mathfrak{B}\sum_\rho m_\rho\left[\mathfrak{R}_\rho^0 U_\rho\right]. \tag{10}$$

Здесь уже можно рассматривать в качестве равноправных, не зависящих друг от друга переменных координаты электронов и ядер, шесть параметров, определяющих систему координат Σ, и шесть компонент векторов $\mathfrak{U}$, $\mathfrak{B}$.

§ 3
Импульсы и функция Гамильтона

Мы образуем теперь импульсы, сопряженные только что перечисленным переменным; учитывая уравнения (3), (4а), (4б), мы получаем

$$\mathfrak{p}_{\alpha x} = \frac{\partial L^*}{\partial u_{\alpha x}} = \mu\bar{u}_{\alpha x}, \tag{11а}$$

$$\mathfrak{P}_{\rho x} = \frac{\partial L^*}{\partial U_{\rho x}} = m_\rho\left(\frac{1}{\lambda^2}\overline{U}_{\rho x} + \mathfrak{U}_x + \left[\mathfrak{B}\mathfrak{R}_\rho^0\right]_x\right), \tag{11б}$$

$$\mathfrak{B}_x = \frac{\partial L^*}{\partial \mathfrak{b}_x} = \mu\sum_\alpha \bar{u}_{\alpha x} + \frac{1}{\lambda}\sum_\rho m_\rho\overline{U}_{\rho x}, \tag{11в}$$

$$\Phi_k = \frac{\partial L^*}{\dot{\varphi}_k} = \sum_x \frac{\partial L^*}{\partial \delta_x}a_{xk} = \sum_x a_{xk}\mathfrak{D}_x, \tag{11г}$$

$$\mathfrak{D}_x = \frac{\partial L^*}{\partial \mathfrak{s}_x} = \mu\sum_\alpha[\mathfrak{r}_\alpha\bar{u}_\alpha] + \frac{1}{\lambda^2}\sum_\rho m_\rho\left[\mathfrak{R}_\rho\overline{U}_\rho\right]_x. \tag{11д}$$

Очевидно, $\mathfrak{B}$ есть полный импульс, $\mathfrak{D}$ — полный момент импульса молекулы. Функция Гамильтона определяется следующим образом:

$$H = \sum_\alpha(u_\alpha\mathfrak{p}_\alpha) + \sum_\rho(U_\rho\mathfrak{P}_\rho) + (\mathfrak{b}\mathfrak{B}) + \sum_{k=1}^{3}\dot{\varphi}_k\Phi_k - L^*. \tag{12}$$

Но так как члены L^*, возникающие из дополнительных условий, оказываются линейными по U_ρ, то они исчезают из H, и мы получаем просто:

$$H = T^{(E)} + T^{(k)} + U. \tag{12а}$$

Таким образом, функция Гамильтона совпадает с энергией; это выгодное обстоятельство связано с тем, что мы использовали дополнительные условия в продифференцированной форме (8), а не в первоначальной (7).

Теперь мы вычислим из уравнений (11а) и (11б) переменные $\bar{u}_\alpha$ и $\overline{U}_\rho$ и подставим найденные значения в уравнения (11в) и (11г); тогда, учитывая формулы (6а) и (7а), мы получим

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{p} + \mathfrak{P} - m\mathfrak{U}, \tag{13а}$$

$$\mathfrak{D} = \mathfrak{g} + \mathfrak{G} - \sum_\rho m_\rho\left[\mathfrak{R}_\rho\left[\mathfrak{B}\mathfrak{R}_\rho^0\right]\right]. \tag{13б}$$

При этом величины

$$\mathfrak{p} = \sum_{\alpha} \mathfrak{p}_{\alpha}, \quad \mathfrak{g} = \sum_{\alpha} [r_{\alpha}\mathfrak{p}_{\alpha}] \tag{14}$$

означают импульс и момент импульса электронов, а величины

$$\mathfrak{P} = \sum_{\rho} \mathfrak{P}_{\rho}, \quad \mathfrak{G} = \sum_{\rho} [\mathfrak{R}_{\rho}\mathfrak{P}_{\rho}] \tag{15}$$

импульс и момент импульса ядер; вследствие дополнительных условий вместо простых равенств $\mathfrak{B} = \mathfrak{p} + \mathfrak{P}$ и $\mathfrak{D} = \mathfrak{g} + \mathfrak{G}$ появляются еще дополнительные члены, содержащие произведения $\mathfrak{U}$, $\mathfrak{B}$. С помощью уравнений (13) векторы $\mathfrak{U}$ и $\mathfrak{B}$ могут быть исключены из задачи. Первое из уравнений (13) дает

$$m\mathfrak{U} = \mathfrak{p} + \mathfrak{P} - \mathfrak{D}. \tag{16}$$

Решение второго относительно $\mathfrak{B}$ можно получить разложением в ряд по степеням λ. Мы напишем (13а)

$$\sum_{\rho} m_{\rho}[\mathfrak{R}^0_{\rho}[\mathfrak{B}\mathfrak{R}^0_{\rho}]] + \lambda \sum_{\rho} m_{\rho}[\mathfrak{R}^{(1)}_{\rho}[\mathfrak{B}\mathfrak{R}^0_{\rho}]] = \mathfrak{g} + \mathfrak{G}^0 + \lambda\mathfrak{G}^{(1)} - \mathfrak{D}, \tag{17}$$

где сделана подстановка

$$\mathfrak{G}^0 = \sum_{\rho} [\mathfrak{R}^0_{\rho}\mathfrak{P}_{\rho}], \quad \mathfrak{G}^{(1)} = \sum_{\rho} [\mathfrak{R}^1_{\rho}\mathfrak{P}_{\rho}]. \tag{18}$$

Суммы в левой части имеют простой смысл, а именно: они просто связаны с моментами инерции и моментами девиации ядер

$$\begin{aligned} A_{xx} &= \sum_{\rho} m_{\rho}(Y_{\rho}^2 + Z_{\rho}^2), \ldots, \\ A_{yz} &= -\sum m_{\rho} Y_{\rho} Z_{\rho}, \ldots . \end{aligned} \tag{19}$$

Подставляя сюда уравнение (1), мы получаем

$$\begin{aligned} A_{xx} &= A^0_{xx} + \lambda A^{(1)}_{xx} + \lambda^2 A^{(2)}_{xx}, \ldots, \\ A_{yz} &= A^0_{yz} + \lambda A^{(1)}_{yz} + \lambda^2 A^{(2)}_{yz}, \ldots . \end{aligned} \tag{20}$$

Здесь, учитывая формулы (6б) и (7б), мы имеем

$$\begin{aligned} A^0_{xx} &= A^0_x = \sum m_{\rho}(Y^{0^2}_{\rho} + Z^{0^2}_{\rho}), \ldots, \\ A^0_{yz} &= 0, \end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned} A^{(1)}_{xx} &= 2\sum_{\rho} m_{\rho}(Y^0_{\rho}Y^{(1)}_{\rho} + Z^{(0)}_{\rho}Z^{(1)}_{\rho}), \ldots, \\ A^{(1)}_{yz} &= -2\sum_{\rho} m_{\rho}Y^0_{\rho}Z^{(1)}_{\rho} = -2\sum_{\rho} m_{\rho}Y^{(1)}_{\rho}Z^0_{\rho}, \ldots, \end{aligned} \tag{22}$$

$$A_{xx}^{(2)} = \sum_\rho m_\rho \left(Y_\rho^{(1)^2} + Z_\rho^{(1)^2}\right), \ldots,$$
$$A_{yz}^{(2)} = -\sum_\rho m_\rho Y_\rho^{(1)} Z_\rho^{(1)}, \ldots . \tag{23}$$

В силу нашего предположения о том, что не все точки $\mathfrak{R}_\rho^0$ лежат на одной прямой, главные моменты инерции нулевого приближения A_x^0, A_y^0, A_z^0, безусловно, не равны нулю.

Но теперь легко видеть, что уравнение (17) можно записать следующим образом:

$$A_x^0 \mathfrak{B}_x + \lambda \frac{1}{2} \sum_y A_{xy}^{(1)} \mathfrak{B}_y = \mathfrak{g}_x + \mathfrak{G}_x^0 - \mathfrak{D}_x + \lambda \mathfrak{G}_x^{(1)}. \tag{24}$$

Предположив, что решение имеет вид

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{B}^0 + \lambda \mathfrak{B}^{(1)} + \lambda^2 \mathfrak{B}^{(2)} + \ldots, \tag{25}$$

мы получим

$$\mathfrak{B}_x^0 = \frac{1}{A_x^0}\left(\mathfrak{g}_x + \mathfrak{G}_x^0 - \mathfrak{D}_x\right), \tag{26а}$$

$$\mathfrak{B}_x^{(1)} = \frac{1}{A_x^0}\left(\mathfrak{G}_x^{(1)} - \frac{1}{2}\sum_y A_{xy}^{(1)} \mathfrak{B}_y^0\right), \tag{26б}$$

$$\mathfrak{B}_x^{(2)} = -\frac{1}{2A_x^0}\sum_y A_{xy}^{(1)} \mathfrak{B}_y^{(1)} = -\frac{1}{2A_x^0}\left(\sum \frac{A_{xy}^{(1)}}{A_y^0}\mathfrak{G}_y^{(1)} - \frac{1}{2}\sum_{y,z} \frac{A_{xy}^{(1)} A_{yz}^{(1)}}{A_y^0}\mathfrak{B}_z^0\right), \tag{26в}$$

....

Теперь мы введем в кинетическую энергию импульсы. В соответствии с уравнениями (4а), (4б) и (11) имеем

$$T^{(E)} = \frac{1}{2\mu}\sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha^2, \tag{27а}$$

$$T^{(K)} = \lambda^2\left(\frac{1}{2}\sum_\rho \frac{1}{m_\rho}\mathfrak{P}_\rho^2 + \frac{1}{2} m \mathfrak{U}^2 + \frac{1}{2}\sum_x A_x^0 \mathfrak{B}_x^2 - \mathfrak{U}\mathfrak{P} - \mathfrak{B}\mathfrak{G}^0\right). \tag{27б}$$

Теперь вместо $\mathfrak{U}$, $\mathfrak{B}$ мы подставим значения (16), (25):

$$T^{(K)} = \lambda^2\left\{\frac{1}{2}\sum_\rho \frac{1}{m_\rho}\mathfrak{P}_\rho^2 + \frac{1}{2m}\left[(\mathfrak{B} - \mathfrak{p})^2 - \mathfrak{P}^2\right] + \frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\left[(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)^2 - \mathfrak{G}_x^{0^2}\right]\right\} -$$
$$- \lambda^3\left\{\sum_x \frac{1}{A_x^0}\mathfrak{G}_x^{(1)}(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x) + \frac{1}{2}\sum_{x,y} \frac{A_{xy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0}(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y - \mathfrak{G}_y^0)\right\} +$$
$$+ \lambda^4\left\{\frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\mathfrak{G}_x^{(1)^2} + \sum_{x,y} \frac{A_{xy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0}\mathfrak{G}_x^{(1)}\left(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y - \frac{1}{2}\mathfrak{G}_y^0\right) +\right.$$
$$\left.+ \frac{3}{8}\sum \frac{A_{xz}^{(1)} A_{zy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0 A_z^0}\left(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x - \mathfrak{G}_x^0\right)\left(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y - \frac{1}{3}\mathfrak{G}_y^0\right)\right\} + \ldots . \tag{27в}$$

Разложим в ряд по λ также потенциальную энергию:

$$U = U_0 + \lambda U_1 + \lambda^2 U_2 + \dots \tag{28}$$

Здесь U_0 есть энергия электронов при покоящихся ядрах, и далее мы имеем

$$U_1 = \sum_{\rho} \sum_{x} \left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho} \right)_0 X_\rho^{(1)}, \tag{28а}$$

$$U_2 = \frac{1}{2} \sum_{\rho,\sigma} \sum_{x,y} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma} \right)_0 X_\rho^{(1)} Y_\sigma^{(1)}, \tag{28б}$$

....

Полная энергия (функция Гамильтона) поэтому приобретает вид

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \dots, \tag{29}$$

где

$$H_0 = \frac{1}{2\mu} \sum_{\alpha} \mathfrak{p}_\alpha^2 + U_0, \tag{29а}$$

$$H_1 = U_1, \tag{29б}$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{\rho} \frac{1}{m_\rho} \mathfrak{P}_\rho^2 + \frac{1}{2m} \left[(\mathfrak{B} - \mathfrak{p}^2) - \mathfrak{P}^2 \right] + \frac{1}{2} \sum_{x} \frac{1}{A_x^0} \left[(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)^2 - \mathfrak{G}_x^{0\,2} \right] + U_2, \tag{29в}$$

$$H_3 = -\sum_{x} \frac{1}{A_x^0} \mathfrak{G}_x^{(1)} (\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x) - \frac{1}{2} \sum_{x,y} \frac{A_{xy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0} (\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y - \mathfrak{G}_y^0) + U_3, \tag{29г}$$

$$H_4 = \frac{1}{2} \sum_{x} \frac{1}{A_x^0} \mathfrak{G}_x^{(1)2} + \sum_{x,y} \frac{A_{xy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0} \mathfrak{G}_x^{(1)} \left(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y - \frac{1}{2} \mathfrak{G}_y^0 \right) + \\ + \frac{3}{8} \sum_{x,y,z} \frac{A_{xz}^{(1)} A_{zy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0 A_z^0} (\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x - \mathfrak{G}_x^0) \left(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y - \frac{1}{3} \mathfrak{G}_y^0 \right) + U_4, \tag{29д}$$

....

К этому можно еще добавить условие

$$\mathfrak{B} = 0,$$

если отвлечься от переноса всей молекулы. Полный момент импульса $\mathfrak{D}$ представляет собой некоторый вектор, фиксированный в пространстве (т. е. относительно системы $\overline{\Sigma}$, но не Σ).

К функции H теперь можно применять метод Гамильтона—Якоби. При этом следующие пары переменных следует считать сопряженными:

$$(x_\alpha, \mathfrak{p}_{\alpha x}), \dots, (\lambda X_\rho^{(1)}, \mathfrak{P}_{\rho x}), \dots, (\varphi_k, \Phi_k),$$

причем величины Φ_k связаны с $\mathfrak{D}$ уравнением (11).

§4

Движение электронов при покоящихся ядрах и при равновесии ядер

Поскольку функция H представлена в виде ряда по степеням λ, мы будем применять методы теории возмущений. При этом мы будем предполагать, что невозмущенная задача с уравнением Гамильтона

$$H_0 = \frac{1}{2\mu}\sum_{\alpha}\mathfrak{p}_{\alpha}^2 + U_0 = E_0$$

может быть решена. Здесь U_0 есть функция координат ядер X_{ρ}^0, Y_{ρ}^0, Z_{ρ}^0, выбранных сначала произвольно, и координат электронов x_{α}, y_{α}, z_{α}. Следовательно, речь здесь идет о задаче определения движения электронов при произвольно выбранных положениях ядер $\mathfrak{R}_{\rho}^0$. Мы предположим, что эта задача уже решена (как это было проделано для положительного молекулярного иона H_2^+ Паули[10] и Ниссеном[11]); таким образом, пусть мы нашли H_0 для любых $X_{\rho}^0, \ldots$ как функцию некоторых интегралов действия $j_1, j_2, \ldots, j_s$:

$$H_0 = E_0\left(j_1, j_2, \ldots, j_s; X_{\rho}^0, Y_{\rho}^0, Z_{\rho}^0\right). \tag{30}$$

Среди интегралов $j_1, j_2, \ldots$ момент импульса электронов, т.е. абсолютная величина вектора

$$\mathfrak{g} = \sum_{\alpha}[r_{\alpha}\mathfrak{p}_{\alpha}]$$

в общем случае *не* встречается; ибо закон сохранения импульса действует только для свободно поворачиваемых систем, тогда как в нашем случае ядра жестко закреплены.

Угловые переменные, сопряженные интегралам $j_1, j_2, \ldots$, пусть будут $w_1, w_2, \ldots$; мы полагаем, что эти переменные w_{α}, j_{α} вводятся вместо координат и импульсов электронов во все слагаемые функции возмущения.

Функция H_0 не содержит импульсов $\mathfrak{P}_{\rho x}, \ldots, \Phi_k$; таким образом, она является вырожденной относительно координат $X_{\rho}, \ldots, \varphi_k$. Эти последние координаты испытывают вековые возмущения, и можно предпринять попытку определить их из уравнения Гамильтона

$$\overline{H}_1 = \overline{U}_1 = E_1, \tag{31}$$

где черта означает усреднение по $w_1, w_2, \ldots$; однако мы сейчас увидим, что это невозможно. Действительно, $\overline{U}_1$ есть линейная функция переменных $X_{\rho}^{(1)}, \ldots$, коэффициенты при которых являются функциями интегралов j_1, $j_2, \ldots$ и координат $X_{\rho}^0, \ldots$. Для того, чтобы можно было оправдать наше допущение о том, что система ядер будет совершать малые колебания около положений $\mathfrak{R}_{\rho}^0$, мы должны добиться того, чтобы энергия E как функция смещений $X_{\rho}^{(1)}, \ldots$ не содержала линейных членов. Поэтому мы должны выбрать положения ядер таким образом, чтобы выполнялись условия

$$\left(\frac{\overline{\partial U}}{\partial X_{\rho}}\right)_0 = 0; \quad \left(\frac{\overline{\partial U}}{\partial Y_{\rho}}\right)_0 = 0; \quad \left(\frac{\overline{\partial U}}{\partial Z_{\rho}}\right)_0 = 0. \tag{32}$$

[10] *Pauli W. jun.* Ann. Phys., 1922, **68**, 177.

[11] *Niessen F. F.* Zur Quantentheorie des Wasserstoffmolekülions. Diss. Utrecht, 1922.

Это и есть известные условия равновесия ядер, которые применялись, например, Паули и Ниссеном[12] к модели H_2^+. Дифференцирование по X_ρ в $\left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho}\right)_0$ при этом следует производить при постоянных x_α, y_α, z_α, $\mathfrak{p}_{\alpha x}, \ldots$, как и в производных (32). Паули[13] доказал также теорему, что

$$\left(\overline{\frac{\partial U}{\partial X_\rho}}\right)_{x\mathfrak{p}_x} = \left(\overline{\frac{\partial H_0(j_k, X_\rho, Y_\rho, Z_\rho)}{\partial X_\rho}}\right)_{j_\alpha} \tag{32a}$$

....

(Здесь индексы x, $\mathfrak{p}_x$ или j_α указывают, какие величины при дифференцировании по X_ρ остаются постоянными.) Доказательство существенно основывается на адиабатической теореме. Именно, имеем

$$\left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho}\right)_0 = \left(\frac{\partial H_0}{\partial X_\rho}\right)_{x,\mathfrak{p}_x} = \left(\frac{\partial H_0}{\partial X_\rho}\right)_{j_\alpha} + \sum_\alpha \frac{\partial H_0}{j_\alpha}\left(\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho}\right)_{x,\mathfrak{p}_x}. \tag{33}$$

Величина $\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho}$ периодическая по переменным w_α; имеем[14]

$$\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho} = -\frac{\partial}{\partial w_\alpha}\frac{\partial S^*}{\partial X_\rho}, \tag{33a}$$

где $S^* = S - \sum_\alpha j_\alpha w_\alpha$ и S — функция действия (невозмущенной) задачи. Среднее по времени значение $\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho}$ равно, таким образом, нулю, чем и доказывается уравнение (33a).

Координаты ядер следует определять из уравнений (32) как функции электронных интегралов $j_1, j_2, \ldots$ В общем случае каждой конфигурации электронов будет принадлежать несколько решений уравнения (32); конечно, применимы из них будут только те, которые соответствуют устойчивому равновесию, т. е. которые при продолжении процесса приближений дают только вещественные собственные колебания ядер.

Мы исключаем, как было сказано выше, сверх того все такие положения равновесия, при которых ядра лежат на одной прямой, так как этот случай требует особого рассмотрения.

Вследствие уравнения (32) мы имеем для $X_\rho^{(1)}, \ldots$ тождественно:

$$\overline{H}_1 = \overline{U}_1 = E_1 = 0. \tag{31a}$$

Таким образом, мы имеем здесь особый случай теории возмущений, когда вековые движения вырожденных переменных не могут быть определены из среднего значения функции возмущения первого порядка, потому что это среднее значение тождественно обращается в нуль. Метод, который следует применять в этом случае, был рассмотрен нами в § 1; здесь мы будем использовать полученные там результаты.

В нашем случае дело упрощается еще тем, что импульсы $\mathfrak{P}_{\rho x}, \ldots$, сопряженные вырожденным переменным, не входят в H_1 совсем. Соответственно мы

---

[12] *Pauli W. jun.* Ann. Phys., 1922, **68**, 177; *Niessen F. F.* Zur Quantentheorie des Wasserstoffmoleküions. Diss. Utrecht, 1922.

[13] *Pauli W. jun.* Ann. Phys., 1922, **68**, 177.

[14] См., например, *Sommerfeld A.* Atombau und Spektrallinien. 3. Aufl. S. 719. — Русский перевод: *Зоммерфельд А.* Строение атома и спектральные линии. Т. 1, 2. М.: Гостехиздат, 1956.

сначала полностью исключим H_1 из функции возмущения с помощью канонического преобразования (4) § 1, производящая функция которого удовлетворяет уравнению (6) § 1; это уравнение здесь гласит

$$\sum_\alpha \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha}\frac{\partial F_1}{\partial w_\alpha} + \sum_\rho \sum_x \left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho}\right)_0 X_\rho^{(1)} = 0. \tag{34}$$

Его решение имеет вид

$$F_1 = \sum_\rho \sum_x \mathfrak{F}_{\rho x} X_\rho^{(1)} = \sum_\rho (\mathfrak{F}_\rho \mathfrak{R}_\rho^{(1)}). \tag{35}$$

Определенные этим уравнением векторы $\mathfrak{F}_\rho$ удовлетворяют условиям

$$\sum_\rho \mathfrak{F}_\rho = 0, \quad \sum_\rho [\mathfrak{R}_\rho^0 \mathfrak{F}_\rho] = 0. \tag{35a}$$

Действительно, если мы подставим в уравнение

$$U_1 = \sum_\rho \sum_x \left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho}\right)_0 X_\rho^{(1)}$$

вместо смещений $\mathfrak{R}_\rho^{(1)}$ их сдвиг или бесконечно малое вращение

$$\mathfrak{R}_\rho^{(1)} = \mathfrak{U} \quad \text{или} \quad \mathfrak{R}_\rho^{(1)} = [\mathfrak{s}\mathfrak{R}_\rho^0],$$

причем переменные j_α, w_α будут оставаться неизменными, то функция U_1 должна обратиться в нуль; тогда из формулы (34) мы получим следствием, что и функция F_1 для этих смещений ядер должна быть тождественно равна нулю по отношению к переменным $X_\rho^{(1)}, \ldots$, и этим доказывается наше утверждение.

Функция (35) соответствует функции (4) § 1 с тем же обозначением; каноническое преобразование (4а,б) § 1 переводит переменные w_α, j_α, $X_\rho^{(1)}$, $\mathfrak{P}_{\rho x}$ в новые величины, которые мы будем ради простоты обозначать теми же буквами. Поскольку функция F_1 совсем не содержит $\mathfrak{P}_{\rho x}$ и является линейной по $X_\rho^{(1)}, \ldots$, то при преобразовании переменные $X_\rho^{(1)}, \ldots$ переходят сами в себя, а сопряженные им импульсы $\mathfrak{P}_{\rho x}, \ldots$ получают приращение $\lambda\mathfrak{F}_{\rho x}, \ldots$ При этом в силу равенства (35а) остаются неизменными величины

$$\mathfrak{P} = \sum_\rho \mathfrak{P}_\rho, \quad \mathfrak{G}^0 = \sum_\rho [\mathfrak{R}_\rho^0 \mathfrak{P}_\rho], \tag{36}$$

а величина

$$\mathfrak{G}^{(1)} = \sum_\rho [\mathfrak{R}_\rho^{(1)} \mathfrak{P}_\rho] \tag{36а}$$

переходит в

$$\mathfrak{G}^{(1)} - \lambda\mathfrak{Q}^{(1)},$$

где сделана подстановка

$$\mathfrak{Q}^{(1)} = \sum_\rho [\mathfrak{R}_\rho^{(1)} \mathfrak{F}_\rho]. \tag{36б}$$

Теперь мы можем применить формулы (5), (8) § 1 для вычисления H в новых переменных. Мы удовлетворимся тем, что сообщим результат этого несколько длинного вычисления, он гласит:

$$H = H_0 + \lambda^2 H_2 + \lambda^3 H_3 + \lambda^4 H_4 + \ldots, \tag{37}$$

где

$$H_0 = H_1, \tag{37а}$$

$$H_2 = \frac{1}{2}\sum_{\rho}\frac{1}{m_\rho}\mathfrak{P}_\rho^2 + \frac{1}{2m}(\mathfrak{p}^2 - \mathfrak{P}^2) + \frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\left[(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)^2 - \mathfrak{G}_y^{0\,2}\right] +$$
$$+ \frac{1}{2}\sum_{\rho,\sigma}\sum_{x,y}[2_{\rho\sigma}^{xy}]X_\rho^{(1)}Y_\sigma^{(1)}, \tag{37б}$$

$$H_3 = \sum_\rho\sum_x[3_\rho^x]\mathfrak{P}_{\rho x} + \sum_\rho\sum_x X_\rho^{(1)}\{[[3_\rho^x]]\} + \sum_y[3_\rho^{xy}]\mathfrak{D}_y + \sum_{y,z}[3_\rho^{xyz}]\mathfrak{D}_y\mathfrak{D}_z +$$
$$+ \sum_\sigma\sum_y[3_{\rho\sigma}^{xy}]\mathfrak{P}_{\sigma y} + \sum_\sigma\sum_{y,z}[3_{\rho\sigma}^{xyz}]\mathfrak{D}_y\mathfrak{P}_{\rho z} + \sum_{\rho,\sigma,\tau}\sum_{x,y,z}[3_{\rho\sigma\tau}^{xyz}]X_\rho^{(1)}Y_\sigma^{(1)}Z_\tau^{(1)}, \tag{37в}$$

$$H_4 = [4] + \sum_\rho\sum_x X_\rho^{(1)}\left\{[4_\rho^x] + \sum_y[4_\rho^{xy}]\mathfrak{D}_y + \sum_y\sum_\sigma[4_{\rho\sigma}^{xy}]\mathfrak{P}_{\sigma y}\right\} +$$
$$+ \sum_{\rho,\sigma}\sum_{x,y}X_\rho^{(1)}Y_\sigma^{(1)}\left\{[[4_{\rho\sigma}^{xy}]] + \sum_z[4_{\rho\sigma}^{xyz}]\mathfrak{D}_z + \sum_{\bar{x}\bar{y}}\left[4_{\rho\sigma}^{x\bar{x}y\bar{y}}\right]\mathfrak{D}_{\bar{x}}\mathfrak{D}_{\bar{y}} +\right.$$
$$+ \sum_z\sum_\tau[4_{\rho\sigma\tau}^{xyz}]\mathfrak{P}_{\tau z} + \sum_\tau\sum_{\bar{x},\bar{y}}\left[4_{\rho\sigma\tau}^{x\bar{x}y\bar{y}}\right]\mathfrak{D}_{\bar{x}}\mathfrak{P}_{\tau\bar{y}} + \sum_{\bar{\rho},\bar{\sigma}}\sum_{\bar{x},\bar{y}}\left[|4_{\rho\bar{\rho}\sigma\bar{\sigma}}^{x\bar{x}y\bar{y}}|\right]\mathfrak{P}_{\bar{\rho}\bar{x}}\mathfrak{P}_{\bar{\sigma}\bar{y}} +$$
$$\left.+ \sum_{\rho,\sigma,\bar{\rho},\bar{\sigma}}\sum_{x,y\bar{x},\bar{y}}[4_{\rho\bar{\rho}\sigma\bar{\sigma}}^{x\bar{x}y\bar{y}}]X_\rho^{(1)}X_{\bar{\rho}}^{(1)}Y_\sigma^{(1)}\overline{Y}_{\bar{\sigma}}^{(1)}\right\}. \tag{37г}$$

При этом скобочные символы суть величины, зависящие только от движения электронов; закон их образования в общем случае настолько сложен, что приводить его не имеет смысла. Мы приведем только первый скобочный символ (в H_2):

$$[2_{\rho\sigma}^{xy}] = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma}\right)_0 + \sum_{\alpha\beta}\frac{\partial^2 H_0}{\partial j_\alpha \partial j_\beta}\frac{\partial \mathfrak{J}_{\rho x}}{\partial w_\alpha}\frac{\partial \mathfrak{J}_{\sigma y}}{\partial w_\beta} +$$
$$+ 2\sum_\alpha\left\{\frac{\partial}{\partial j_\alpha}\left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho}\right)\frac{\partial \mathfrak{J}_{\sigma y}}{\partial w_\alpha} + \frac{\partial}{\partial j_\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial Y_\sigma}\right)_0\frac{\partial \mathfrak{J}_{\rho x}}{\partial w_\alpha}\right\}. \tag{38}$$

Заметим еще, что два члена H_3, которые мы записали здесь в виде

$$\sum_\rho\sum_x X_\rho^{(1)}\left\{\sum_\sigma\sum_y[3_{\rho\sigma}^{xy}]\mathfrak{P}_{y\sigma} + \sum_\sigma\sum_{y,z}[3_{\rho\sigma}^{xyz}]\mathfrak{D}_y\mathfrak{P}_{z\sigma}\right\}, \tag{39а}$$

возникли из членов, имеющихся в формуле (29а) для H_3:

$$\frac{1}{2}\sum_{x,y}\frac{A_{xy}^{(1)}}{A_x^0 A_y^0}(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)\mathfrak{G}_y^0 - \sum_x\frac{1}{A_x^0}\mathfrak{G}_x^{(1)}(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x). \tag{39б}$$

Позднее мы еще воспользуемся ими.

§ 5
Гироскопическое движение и колебания электронов как вековое возмущение

Теперь можно определить вековые движения ядер из функции

$$\bar{H}_2 = \frac{\overline{\mathfrak{p}^2}}{2m} + \frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\left(\overline{\mathfrak{g}_x^2} - \overline{\mathfrak{g}_x}^2\right)\frac{1}{2}\sum_\rho \frac{1}{m_\rho}\mathfrak{P}_\rho^2 - \frac{1}{2m}\mathfrak{P}^2 +$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{\rho,\sigma}\sum_{x,y}\left[\overline{2_{\rho\sigma}^{xy}}\right]X_\rho^{(1)}Y_\sigma^{(1)} + \frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\left[\left(\mathfrak{D}_x - \overline{\mathfrak{g}_x}\right)^2 - \mathfrak{G}_x^{0\,2}\right] = E_2, \qquad (40)$$

где черта означает усреднение по движению электронов.

Это дифференциальное уравнение Гамильтона может быть решено разделением переменных; действительно, оно немедленно распадается на две части, из которых первая соответствует колебаниям ядер, а вторая — гироскопическим движениям.

Сначала мы рассмотрим часть, соответствующую колебаниям, а именно

$$\frac{1}{2}\sum_\rho \frac{1}{m_\rho}\mathfrak{P}_\rho^2 + \frac{1}{2}\sum_{\rho,\sigma}\sum_{x,y}\left[\overline{2_{\rho\sigma}^{xy}}\right]X_\rho^{(1)}Y_\sigma^{(1)} - \frac{1}{2m}\mathfrak{P}^2 - \frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\mathfrak{G}_x^{0\,2} = E_2^{(s)}. \qquad (41)$$

В качестве квазиупругих сил здесь выступают усредненные скобочные символы $[\overline{2_{\rho\sigma}^{xy}}]$. Мы покажем, что они идентичны с величинами

$$\left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial x_\rho \partial Y_\sigma}\right)_{j_\alpha},$$

используемыми Паули и Ниссеном[15] для вычисления колебаний ядер.

Заметим сначала, что из уравнений (32), (32а), (33), (33а) и (35) следует

$$\mathfrak{F}_{\rho x} = \frac{\partial S^*}{\partial X_\rho}; \quad \frac{\partial \mathfrak{F}_{\rho x}}{\partial w_\alpha} = -\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho}. \qquad (33б)$$

Теперь, аналогично уравнению (38), имеем

$$\left(\frac{\partial^2 U}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma}\right)_{x,\mathfrak{p}_x} = \left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma}\right)_{j_\alpha} + 2\sum_\alpha\left\{\left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial X_\rho \partial j_\alpha}\right)\frac{\partial j_\alpha}{\partial Y_\sigma} + \left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial Y_\sigma \partial j_\alpha}\right)\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho}\right\} +$$

$$+\sum_{\alpha,\beta}\frac{\partial^2 H_0}{\partial j_\alpha \partial j_\beta}\frac{\partial j_\alpha}{\partial X_\rho}\frac{\partial j_\beta}{\partial Y_\sigma} + \sum_\alpha \frac{\partial H_0}{\partial j_\alpha}\frac{\partial^2 j_\alpha}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma}.$$

Отсюда, подставляя $\partial j_\alpha/\partial X_\rho$ из (33б) и $(\partial H/\partial X_\rho)_{j_\alpha}$ из (32а) и образуя среднее (причем величина $\partial^2 j_\alpha/(\partial X_\rho \partial Y_\sigma)$ в соответствии с уравнением (33а) равна нулю), мы получаем

$$\left(\frac{\partial^2 H_0}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma}\right)_{j_\alpha} = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial X_\rho \partial Y_\sigma}\right)_{x,\mathfrak{p}_x} + 2\sum_\alpha\left\{\overline{\frac{\partial}{\partial j_\alpha}\left(\frac{\partial U}{\partial X_\rho}\right)_{x,\mathfrak{p}_x}\frac{\partial \mathfrak{F}_{\sigma y}}{\partial w_\alpha}} +\right.$$

$$\left. + \overline{\frac{\partial}{\partial j_\alpha}\left(\frac{\partial U}{\partial Y_\sigma}\right)_{x,\mathfrak{p}_x}\frac{\partial \mathfrak{F}_{\rho x}}{\partial w_\alpha}}\right\} + \sum_{\alpha,\beta}\overline{\frac{\partial^2 H_0}{\partial j_\alpha \partial j_\beta}\frac{\partial \mathfrak{F}_{\rho x}}{\partial w_\alpha}\frac{\partial \mathfrak{F}_{\sigma y}}{\partial w_\beta}} = \left[\overline{2_{\rho\sigma}^{xy}}\right]. \qquad (38а)$$

---

[15] *Pauli W. Jun.* Ann. Phys., 1922, **68**, 177; *Niessen F. F.* Zur Quantentheorie des Wasserstoffmolekülions. Diss. Utrecht, 1922.

Таким образом, квазиупругие силы, как и следовало ожидать, определяются вторыми производными энергии по координатам ядер при постоянных значениях интегралов действия.

В функции энергии $E_2^{(s)}$ можно разделить переменные, введя нормальные координаты. Для нахождения последних мы напишем уравнения колебаний

$$m\ddot{X}_\rho^{(1)} + \sum_\sigma \sum_y \left[\,\overline{2^{xy}_{\rho\sigma}}\,\right] Y_\sigma^{(1)} = 0 \tag{42}$$

и будем искать их решения в виде

$$X_\rho^{(1)} \sim e^{iwt}.$$

Тогда мы получим систему линейных уравнений

$$w^2 m X_\rho^{(1)} - \sum_\sigma \sum_y \left[\,\overline{2^{xy}_{\rho\sigma}}\,\right] Y_\sigma^{(1)} = 0. \tag{42a}$$

Условие ее разрешимости состоит в исчезновении определителя системы; это дает уравнение для w степени $3N$, имеющее $3N$ вещественных неотрицательных корней

$$w_1^{0\,2},\quad w_2^{0\,2},\quad \ldots,\quad w_{3N}^{0\;\,2}.$$

Из них в общем случае равны нулю шесть, соответствующих сдвигам

$$\mathfrak{R}_\rho^{(1)} = \mathfrak{U}$$

и вращениям (с угловой скоростью $\mathfrak{s}$)

$$\mathfrak{R}_\rho^{(1)} = \left[\mathfrak{s}\mathfrak{R}_\rho^0\right].$$

Действительно, при этих движениях относительные положения ядер не изменяются, и квазиупругие силы поэтому исчезают.

Единственным исключением здесь опять будет случай, когда все положения покоя ядер лежат на одной прямой; тогда обращаются в нуль только пять частот, поскольку вращение вокруг линии соединения ядер отпадает. Этот случай мы рассмотрим отдельно.

Мы пронумеруем частоты w_α^0 так, чтобы шесть равных нулю частот были последними $(3N-5,\ldots,3N)$.

Если мы будем повторять каждую частоту столько раз, сколько это соответствует ее кратности, то каждой частоте w_τ^0 можно будет сопоставить решение

$$X_\rho^{(1)} = \mathfrak{U}_{\rho x}^{(\tau)},\ldots \quad \left(\text{векторно}\quad \mathfrak{R}_\rho^{(1)} = \mathfrak{U}_\rho^{(\tau)};\quad \tau = 1,2,\ldots,3N\right)$$

таким образом, что будут выполняться следующие условия ортогональности и нормировки

$$\sum_\rho m_\rho \mathfrak{U}_\rho^{(\tau)} \mathfrak{U}_\rho^{(\tau')} = \begin{cases} 0, & \tau \neq \tau', \\ 1, & \tau = \tau'. \end{cases} \tag{43}$$

Мы выбрали выше систему координат так, что ее начало находится в центре тяжести, а оси координат совпадают с главными осями инерции системы при покоящихся в равновесии ядрах, так что выполняются условия

$$\sum_\rho m_\rho \mathfrak{R}_\rho^0 = 0, \quad \sum_\rho m_\rho Y_\rho^0 Z_\rho^0 = 0, \quad \ldots\,.$$

Учитывая это, мы можем выразить шесть решений, соответствующих нулевым частотам, которые мы будем называть «несобственными нормальными колебаниями», с помощью параллельных координатным осям единичных векторов i_1, i_2, i_3 следующим образом:

$$w^0_{3N-5} = 0, \quad w^0_{3N-4} = 0, \quad w^0_{3N-3} = 0,$$
$$\mathfrak{U}^{3N-5}_\rho = \frac{i_1}{\sqrt{m}}, \quad \mathfrak{U}^{3N-4}_\rho = \frac{i_2}{\sqrt{m}}, \quad \mathfrak{U}^{3N-3}_\rho = \frac{i_3}{\sqrt{m}}; \tag{44а}$$

$$w^0_{3N-2} = 0, \quad w^0_{3N-1} = 0, \quad w^0_{3N} = 0,$$
$$\mathfrak{U}^{3N-2}_\rho = \frac{[i_1\mathfrak{R}^0_\rho]}{\sqrt{A^0_x}}, \quad \mathfrak{U}^{3N-1}_\rho = \frac{[i_2\mathfrak{R}^0_\rho]}{\sqrt{A^0_y}}, \quad \mathfrak{U}^{3N}_\rho = \frac{[i_3\mathfrak{R}^0_\rho]}{\sqrt{A^0_z}}. \tag{44б}$$

«Собственные» нормальные колебания, числом $3N-6$, удовлетворяют теперь следующим соотношениям ортогональности, которые получаются из условий (43) при использовании равенств (44а,б):

$$\sum_\rho m_\rho \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho = 0, \quad \sum_\rho m_\rho [\mathfrak{R}^0_\rho \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho] = 0, \tag{45а}$$

$$\sum_\rho m_\rho \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho \mathfrak{U}^{(\sigma)}_\rho = \begin{cases} 0, & \tau \neq \sigma, \\ 1, & \tau = \sigma \end{cases} \quad (\tau, \sigma = 1, 2, \ldots, 3N-6). \tag{45б}$$

Нормальные координаты Q_τ определяются линейным преобразованием

$$Q_\tau = \sum_\rho \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho \mathfrak{R}^{(1)}_\rho \quad \text{или} \quad \mathfrak{R}^{(1)}_\rho = \sum_\tau \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho Q_\tau; \tag{46а}$$

сопряженные импульсы, соответственно, определяются преобразованием

$$P_\tau = \sum_\rho \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho \mathfrak{P}_\rho \quad \text{или} \quad \frac{1}{m_\rho}\mathfrak{P}_\rho = \sum_\tau \mathfrak{U}^{(\tau)}_\rho Q_\tau. \tag{46б}$$

Нормальные координаты и импульсы, соответствующие нулевым частотам, имеют простой смысл; из равенств (44а,б) и (46а,б) мы находим

$$Q_{3N-5} = \frac{1}{\sqrt{m}}\sum_\rho m_\rho X^{(1)}_\rho, \quad Q_{3N-2} = \frac{1}{\sqrt{A^0_x}}\sum_\rho m_\rho \left[\mathfrak{R}^0_\rho \mathfrak{R}^{(1)}_\rho\right]_x,$$
$$Q_{3N-4} = \frac{1}{\sqrt{m}}\sum_\rho m_\rho Y^{(1)}_\rho, \quad Q_{3N-1} = \frac{1}{\sqrt{A^0_y}}\sum_\rho m_\rho \left[\mathfrak{R}^0_\rho \mathfrak{R}^{(1)}_\rho\right]_y, \tag{47а}$$
$$Q_{3N-3} = \frac{1}{\sqrt{m}}\sum_\rho m_\rho Z^{(1)}_\rho, \quad Q_{3N} = \frac{1}{\sqrt{A^0_z}}\sum_\rho m_\rho \left[\mathfrak{R}^0_\rho \mathfrak{R}^{(1)}_\rho\right]_z;$$

далее:

$$P_{3N-5} = \frac{1}{\sqrt{m}}\mathfrak{P}_x, \quad P_{3N-4} = \frac{1}{\sqrt{m}}\mathfrak{P}_y, \quad P_{3N-3} = \frac{1}{\sqrt{m}}\mathfrak{P}_z,$$
$$P_{3N-2} = \frac{1}{\sqrt{A^0_x}}\mathfrak{G}^0_x, \quad P_{3N-1} = \frac{1}{\sqrt{A^0_y}}\mathfrak{G}^0_y, \quad P_{3N} = \frac{1}{\sqrt{A^0_z}}\mathfrak{G}^0_z. \tag{47б}$$

В силу дополнительных условий (7а,б) получаем

$$Q_{3N-5} = 0, \quad \ldots, \quad Q_{3N} = 0. \tag{48}$$

Если вместо $X_\rho^{(1)}$, $\mathfrak{P}_\rho$ мы введем канонические переменные Q_τ, P_τ, то уравнения движения

$$\dot{Q}_\tau = \frac{\partial H}{\partial P_\tau}, \quad \dot{P}_\tau = -\frac{\partial H}{\partial Q_\tau}$$

будут иметь решения (48); но отсюда следует, что функция H не должна зависеть от $P_{3N-5}, \ldots, P_{3N}$.

В действительности мы видим сначала, что усредненная энергия $\dot{E}_2^{(s)}$ (41) сводится к

$$E_2^{(s)} = \frac{1}{2}\sum_\tau \left(P_\tau^2 + w_\tau^{0^2} Q_\tau^2\right), \tag{49}$$

где сумма берется только по собственным нормальным частотам. Вводя далее переменные P_τ, Q_τ во все слагаемые $H_2, H_3, \ldots$ функции возмущения, мы видим, что с учетом равенств (47б) импульсы $P_{3N-5}, \ldots, P_{3N}$ сокращаются сами собой. Например, легко убедиться в этом, вычисляя два члена H_3, указанные в уравнении (39б). Во всяком случае, можно вычеркивать все члены, относящиеся к несобственным нормальным частотам, а с ними и векторы $\mathfrak{P}$ и $\mathfrak{G}^0$.

В формуле (49) переменные разделены; решение задачи о колебаниях можно получить с помощью канонического преобразования

$$\begin{aligned} Q_\tau &= \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{J_\tau}{2\nu_\tau^0}}\cos 2\pi W_\tau, \\ P_\tau &= -\sqrt{2J_\tau\nu_\tau^0}\sin 2\pi W_\tau, \end{aligned} \qquad \left(\nu_\tau^0 = \frac{w_\tau^0}{2\pi}\right), \tag{50}$$

где J_τ, W_τ означают переменные действия и угловые координаты колебания ядер. Тогда энергия приобретает вид

$$E_2^{(s)} = \sum_\tau J_\tau \nu_\tau^0. \tag{51}$$

Обратимся теперь к гироскопической части E_2, которая в подробной записи имеет вид

$$E_2^{(r)} = \frac{1}{2}\left[\frac{(\mathfrak{D}_x - \mathfrak{g}_x)^2}{A_x^0} + \frac{(\mathfrak{D}_y - \mathfrak{g}_y)^2}{A_y^0} + \frac{(\mathfrak{D}_z - \mathfrak{g}_z)^2}{A_z^0}\right]. \tag{52}$$

Следовательно, речь здесь идет не об обычном волчке, но о «гироскопическом теле со встроенным маховиком», недавно рассматривавшимся Крамерсом и Паули[16]. Эти авторы показали, каким образом можно наложить на эту систему квантовые условия; поэтому мы не будем больше обсуждать этот вопрос, а возьмем лишь результат. Можно ввести две пары переменных действия и угловых переменных вращения J, W и J', W' так, что $E_2^{(r)}$ будет функцией только J, J' (функцией волчка K):

$$E_2^{(r)} = K(J, J'). \tag{53}$$

[16] *Kramers H.A.* Zs. Phys., 1923, **13**, 343; *Kramers H.A., Pauli W. jun.* Zs. Phys., 1923, **13**, 351. Наша формула (52) идентична с формулой (19) первой и формулой (1) второй из цитированных работ.

При этом $J = |\mathfrak{D}|$ означает полный момент импульса молекулы; сопряженная угловая переменная W является строго циклической (и, значит, не входит в высшие приближения функции энергии $H_3, H_4, \ldots$).

Полная энергия вековых движений теперь принимает вид

$$E_2 = E_2^0 + E_2^{(s)} + E_2^{(r)} = E_2^0 + \sum_\tau \nu_\tau^0 J_\tau + K(JJ'), \tag{54}$$

где введено сокращенное обозначение

$$E_2^0 = \frac{\mathfrak{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}\sum_x \frac{1}{A_x^0}\left(\overline{g_x^2} - \overline{g_x}^2\right). \tag{54a}$$

§ 6
Высшие приближения

Если мы хотим перейти к высшим приближениям, то следует ввести в $H_3, H_4, \ldots$ переменные J_τ, W_τ ($\tau = 1, \ldots, 3N-6$) и $H_3, H_4, \ldots$; что касается зависимости от W_τ, то $H_3, H_4, \ldots$ будут полиномами 3-й, 4-й, … степени относительно $\cos 2\pi W_\tau$ и $\sin 2\pi W_\tau$. Далее следует действовать по методу, указанному в § 1.

Прежде всего можно показать, что при усреднении по движению электронов и ядер мы имеем

$$\overline{\overline{H}}_3 = E_3 = 0.$$

Ибо, рассматривая выражение (37в) для H_3, мы видим, что оно содержит, кроме нечетных относительно переменных $X_\rho^{(1)}, \ldots$ и $\mathfrak{P}_{\rho x}, \ldots$ членов, только такие члены четного порядка, в которых содержатся произведения $X_\rho^{(1)}\mathfrak{P}_{\sigma y}$. Но в соответствии с соотношениями (46а,б) переменные $X_\rho^{(1)}$ зависят только от Q_τ, а переменные $\mathfrak{P}_{\rho x}$ только от P_τ; в соответствии с формулами (50) разность фаз между Q_τ и P_τ равна $\pi/2$. Следовательно, при усреднении по W_τ все члены H_3 обращаются в нуль. Для того, чтобы теперь вычислить H_4, необходимо по рецепту § 1 сначала определить функцию F_2 с помощью дифференциального уравнения (11б) § 1; эта функция выражает обратное влияние колебаний ядер и гироскопических движений на орбиты электронов; легко видеть, что та часть ее F_2^0, которая в соответствии с формулой (12б) § 1 однозначно определяется дифференциальным уравнением, будет полином второй степени относительно $\sqrt{J_\tau}\cos 2\pi W_\tau$.

Следующий шаг состоит в том, что мы образуем среднее значение $\overline{H}_3$ по движению электронов и затем вычисляем G_1 из дифференциального уравнения (13а) § 1, в котором вследствие равенств (55) следует положить $E_3 = 0$. При этом G_1 будет полиномом третьей степени относительно $\sqrt{J_\tau}\cos 2\pi W_\tau$ и $\sin 2\pi W_\tau$.

Вслед за тем можно образовать $\overline{\Phi}_4$ по уравнению (14) § 1; мы получим полином четвертой степени относительно $\sqrt{J_\tau}\cos 2\pi W_\tau$ и $\sqrt{J_\tau}\sin 2\pi W_\tau$. Наконец, вычисляя в соответствии с уравнением (15) § 1 среднее значение $\overline{\Phi}_4$ по движению ядер

$$\overline{\overline{\Phi}}_4 = E_4,$$

мы получим полином, содержащий $\sqrt{J_\tau}$ в нулевой, второй и четвертой степени; коэффициенты при первых двух степенях будут зависеть как от электронных интегралов $j_1, j_2, \ldots$, так и от гироскопических интегралов J, J'; коэффициенты

при четвертой степени будут зависеть только от $j_1, j_2, \ldots$ Поэтому мы можем написать

$$E_4 = E_0^{(1)}(J, J') + \sum_{\tau} J_\tau \nu_\tau^{(1)}(J, J') + \frac{1}{2} \sum_{\tau,\sigma} \nu_{\tau\sigma}^0 J_\tau J_\sigma. \tag{56}$$

Обрывая процесс приближений на этом месте, мы получим для полной энергии молекулы следующее представление

$$E = \left[E_0 + \lambda^4 E_0^{(1)}(J, J')\right] + \lambda^2 \left\{ K(J, J') + \sum_{\tau} \left[\nu_\tau^0 + \lambda^2 \nu_\tau^{(1)}(J, J')\right] J_\tau \right\} + \lambda^4 \frac{1}{2} \sum_{\tau,\sigma} \nu_{\tau\sigma}^0 J_\tau J_\sigma. \tag{57}$$

Формула (57) для энергии имеет зависимость от J_τ точно такого же вида, как энергия системы резонаторов с учетом членов до четвертого порядка в потенциальной энергии включительно[17]. Однако коэффициенты здесь не постоянные, а функции квантовых чисел, принадлежащих движению электронов и гироскопическим движениям. Зависимость от электронных квантовых чисел можно вообще определить, разумеется, только в том случае, если будет задана конкретная модель молекулы. Зависимость от квантовых чисел гироскопического движения можно определить в принципе полностью, однако в общем случае вычисления оказываются слишком сложными, чтобы ими стоило заниматься при теперешнем состоянии экспериментальных данных о полосатых спектрах. Существенные упрощения наступают только в случае, когда положения равновесия всех ядер лежат на одной прямой; к этому случаю, который был категорически исключен в данной работе, мы вернемся позднее. Здесь мы скажем только, что тогда возникают новые осложнения из-за появления вырожденных состояний. Это имеет место уже для двухатомных молекул, если вместе с Кратцером[18], Крамерсом и Паули[19] мы будем предполагать, что средний момент импульса электронов $\mathfrak{g}$ не совпадает по направлению с линией соединения ядер; в действительности это возможно только в том случае, если циклическая координата электронного движения (азимут относительно оси ядер) оказывается вырожденной сама по себе или случайно[20]; на это обстоятельство названные авторы не обратили внимания. Для трех- и многоатомных молекул прибавляется еще одно вырождение, касающееся колебаний ядер перпендикулярно оси ядер. Этот случай заслуживает подробного рассмотрения, если учесть возможность того, что он реализуется для таких молекул, как H_2O или CO_2.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Молекула рассматривается как механическая система, состоящая из ядер и электронов и находящаяся в состоянии динамического равновесия; из этого общего представления должна систематически развиваться теория полосатых спектров.

2. Математическое решение этой задачи основывается на том, что функция энергии разлагается в ряд по степеням λ, причем λ^2 по порядку величины есть отношение массы электрона к массе ядра.

3. Отыскиваются такие решения задачи о движении, при которых ядра удаляются от жестко связанных положений равновесия только на длину порядка λ.

---

[17] *Born M., Brody E.* Zs. Phys., 1921, **6**, 140; см. также *Born B., Hückel E.* Zs. Phys., 1923, **24**, 1.

[18] *Kratzer A.* Ann. Phys., 1923, **71**, 72.

[19] *Kramers H.A.* Zs. Phys., 1923, **13**, 343; *Kramers H.A., Pauli W.* Zs. Phys., 1923, **13**, 351.

[20] *Born M., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1923, **14**, 44.

О положениях равновесия ядер сделано предположение, что они не все лежат на одной прямой; вырожденный случай, когда они все лежат на одной прямой, должен быть рассмотрен позднее. Квантовая теория учитывается при помощи требования, чтобы для искомых решений все импульсы и моменты импульсов оставались конечными при $\lambda = 0$.

4. Для математической формулировки требований, перечисленных в п. 3, вводится подвижная система координат, в которой равновесные положения ядер покоятся. Шесть параметров, определяющих эту систему отсчета, рассматриваются в качестве дополнительных координат; для сохранения числа степеней свободы служат шесть дополнительных условий, которые требуют, чтобы подвижная система координат как можно лучше описывала истинное движение ядер.

5. Из функции Гамильтона для этой задачи могут быть исключены множители Лагранжа, соответствующие этим дополнительным условиям.

6. Механическая задача может быть затем решена методами теории возмущений. Невозмущенная система образована из электронов при жестко фиксированных ядрах. Координаты ядер играют роль вырожденных переменных.

7. Функция возмущения первого порядка при усреднении обращается в нуль вследствие требования, что должны существовать равновесные положения ядер. Поэтому обычный метод определения вековых возмущений координат ядер оказывается неприменимым. Предлагаемый здесь метод в абстрактной форме излагается в § 1; он исходит из того, что при помощи подходящего канонического преобразования функция возмущения первого порядка может быть тождественно обращена в нуль.

8. Функция возмущения второго порядка определяет одновременно колебания ядер и гироскопические движения как вековые возмущения. Разделение переменных для колебаний может быть произведено известным образом благодаря введению нормальных координат. Гироскопические члены совпадают с энергией «гироскопического тела со встроенным маховиком», исследованной Крамерсом и Паули; они могут быть рассмотрены по указанному этими авторами методу при помощи разделения переменных.

9. Функция возмущения третьего порядка не вносит вклада в энергию; функция возмущения четвертого порядка дает в энергию вклад, зависящий от квантовых чисел колебаний ядер квадратично, а от квантовых чисел электронного движения и вращения очень сложным образом.

10. Исключенный в этой работе случай, когда ядра в равновесии лежат на одной прямой, приводит к новым видам вырождения; именно, в случае двухатомных молекул, момент импульса которых не совпадает по направлению с осью ядер, вырождается сопряженная моменту циклическая переменная, для многоатомных молекул вырожденными будут еще колебания ядер перпендикулярно оси.

(*Поступила 21 декабря 1923 г.*)

ОБ ИЗМЕНЕНИИ ФОРМАЛЬНЫХ ПРАВИЛ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ В ПРОБЛЕМЕ АНОМАЛЬНОГО ЭФФЕКТА ЗЕЕМАНА*

В работе предпринята попытка при помощи простого обобщения квантовотеоретических правил получить формальное описание части тех явлений, которые происходят при связи нескольких электронов. В частности, показано, что возражения против принципа построения по статистическим весам, а также «законов перманентности» эффекта Зеемана не допускают иной интерпретации, кроме как предположения о том, что энергия связи определяется не одним, а несколькими квантовыми числами.

Введение

С тех пор, как экспериментальные данные [1)] по аномальному эффекту Зеемана были систематизированы Ланде [2)] в соответствии с известными в то время квантовотеоретическими принципами и представлены в виде формул, становится все яснее, что объяснение явлений аномального эффекта Зеемана с необходимостью повлечет за собой глубокие изменения в наших квантовотеоретических представлениях [3)]. Особенно отчетливо это проявляется в несостоятельности принципа построения по статистическим весам атомного остова и электрона [4)].

Хотя мы еще далеки от истинного объяснения принципиальных трудностей, встречающихся в эффекте Зеемана, нам все же кажется, что определенного успеха с формальной точки зрения удается достичь путем простого изменения правил квантовой теории. Мы намереваемся показать, что предлагаемые нами изменения [5)] правил позволяют получить не только описания принципа построения, но и g-факторы Ланде, а также столь характерные для аномального эффекта Зеемана законы перманентности [6)].

---

* Über eine Abänderung der formalen Regeln der Quantentheorie beim Problem der anomalen Zeemaneffekte. — Zs. Phys., 1924, **26**, H. 4–5, S. 291–307. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1)] *Back E.* Ann. d. Phys., 1923, **70**, 333; Zs. Phys., 1923, **15**, 206.

[2)] *Landé A.* Zs. Phys., 1921, **5**, 231; Zs. Phys., 1921, **22**, 117; Zs. Phys., 1922, **11**, 353; Zs. Phys., 1923, **15**, 189; Zs. Phys., 1923, **16**, 391; Zs. Phys., 1923, **19**, 112.

[3)] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **24**, 441.

[4)] *Bohr N.* Ann. d. Phys., 1923, **71**, 228.

[5)] Пользуясь случаем, я хотел бы поблагодарить проф. Бора за разностороннюю помощь, которую я извлекал из его советов.

[6)] *Pauli W.* Zs. Phys., 1923, **16**, 155; *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **19**, 112; *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1922, **8**, 273.

§ 1
Формулировка нового квантового принципа

К обобщению квантовых правил, о котором идет речь, приводит непосредственно рассмотрение формулы Ланде, задающей значения g [7].

Воспользуемся обозначениями и нормировкой Ланде: пусть R — момент импульса атомного остова, K — момент импульса внешнего электрона, J — полный момент импульса атома. Тогда

$$g = 1 + \frac{\left(J+\frac{1}{2}\right)\left(J-\frac{1}{2}\right) + R^2 - K^2}{\left(J+\frac{1}{2}\right)\left(J-\frac{1}{2}\right)}. \qquad (1)$$

Согласно принципу строения, следовало бы ожидать, что значение J встретится повторно как момент импульса атомного остова в ближайшем атоме с большим числом электронов. Однако в спектре ближайшего атома мы обнаруживаем две мультиплетные системы с R — моментом импульса, равным $J + 1/2$ и $J - 1/2$. Отсюда с необходимостью следует, что значению энергии связи следует ставить в соответствие не квантовое число момента импульса J, а два числа $(J + 1/2, J - 1/2)$, поскольку и в формулу для g, и в R — момент импульса ближайшего элемента с бóльшим числом вместо J всегда входит пара чисел $(J + 1/2, J - 1/2)$. Откладывая на время обсуждение физического смысла предлагаемого нами формализма, мы вводим новое квантовое правило: любое заданное значение энергии связи между электроном и квантовым остовом связано не со значением J квантового числа полного момента импульса, как предполагалось ранее, а с *двумя* такими числами ($(J + 1/2, J - 1/2)$ в наших обозначениях). Значение энергии связи можно вычислить, заменив в формуле

$$H = \frac{\partial F}{\partial J} \qquad (2)$$

(интегральный инвариант F мы определяем как $F = \int H\,dJ$) производную в правой части конечной разностью $\Delta F = F(J + 1/2) - F(J - 1/2)$. Следовательно, получающееся значение энергии квантовомеханической связи (в отличие от H_{kl} мы обозначаем ее H_{qu}) удовлетворяет соотношению

$$H_{qu} = F\left(J+\frac{1}{2}\right) - F\left(J-\frac{1}{2}\right) = \Delta F = \int_{-1/2}^{+1/2} H_{kl}\,dJ. \qquad (3)$$

Чтобы подчеркнуть формальную аналогию между этим правилом и условием частот, запишем последнее в виде

$$\nu_{qu} = \Delta H = \int \nu_{kl}\,dJ_k. \qquad (4)$$

Из нового квантового правила, представленного в виде (3), мы узнаем, во-первых, что в предельном случае большие квантовые числа H_{qu} и H_{kl} приближенно равны и, во-вторых, что H_{qu} формально можно получить просто усреднением H_{kl}.

Покажем, что построенная Ланде [8] и Паули [9] эрзац-модель позволяет получить правильные значения g и закон перманентности.

---

[7] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **15**, 189.

[8] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **19**, 112.

[9] *Pauli W.* Zs. Phys., 1924, **20**, 371.

5 Зак. 6

§2
Эрзац-модель

Условимся в дальнейшем обозначать через k момент импульса внешнего электрона, через m — компоненту полного момента импульса в направлении поля (внешнего поля H), через p_r и p_k — компоненты r и k в направлении поля, через j — полный момент импульса, через φ_r, φ_k и ψ — углы, сопряженные с p_r, p_k и j. Таким образом, φ_r и φ_k означают азимуты моментов импульса r и k относительно направления поля, ψ — угол между плоскостью rkj и плоскостью jH. Следуя Паули[10], предположим, что в нашей модели атомный остаток обладает двойным магнетизмом. Заглавными буквами R, K, J мы обозначим квантовые числа моментов импульса r, k и j. Интенсивность внешнего магнитного поля характеризуется ларморовской частотой o. Для упрощения записи мы будем у всех моментов импульса опускать множитель $h/2\pi$, превращая их тем самым в безразмерные числа.

Механическая задача, возникающая в связи с эрзац-моделью, была подробно рассмотрена Паули[11]. Мы лишь повторим наиболее существенные детали вычислений.

Для математического описания рассматриваемой задачи можно воспользоваться переменными двух типов:

$$\text{I) } r, k, m, j \quad \text{и} \quad \psi;$$
$$\text{II) } r, k, m, p_k \quad \text{и} \quad \varphi_k - \varphi_r$$

и, соответственно,

$$r, k, m, p_r \quad \text{и} \quad \varphi_r - \varphi_k.$$

В обоих случаях мы имеем задачу с одной степенью свободы и сопряженными переменными: либо j и ψ, либо p_k, $\varphi_k - \varphi_r$ и p_k, $\varphi_r - \varphi_k$. Переменные первого типа более пригодны в случае слабого внешнего поля, переменные второго типа оказываются более удобными для средних и сильных внешних полей.

Полная энергия атома во внешнем поле состоит из трех частей: действия поля H на внешний электрон $k\cos(kH)oh$, на атомный остов $2r\cos(rH)oh$ и взаимодействия между электроном и атомным остовом. Если желательно сохранить правильные «пропорции интервалов»[12], то, как известно, последнее взаимодействие следует приближенно заменить косинусом между r и k. Однако мы сначала не будем принимать это предложение, чтобы показать, что значения g и закон перманентности от него не зависят.

Функция Гамильтона H для выбранной нами модели в переменных I типа имеет следующий вид:

$$\frac{1}{h}H = o\left\{m\left(2\frac{j^2+r^2-k^2}{2j^2} + \frac{j^2+k^2-r^2}{2j^2}\right) + \frac{\cos\psi}{2j^2} \times \right.$$
$$\left. \times \sqrt{(j^2-m^2)\left[(k+r)^2-j^2\right]\left[(j^2-(k-r)^2\right]}\right\} + f\left(\frac{j^2-k^2+r^2}{2kr}\right). \quad (5)$$

---

[10] *Pauli W.* Zs. Phys., 1924, **20**, 371.

[11] Ibid.

[12] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **15**, 189; *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1922, **8**, 273.

Действительно,

$$\cos(kj) = \frac{j^2 + k^2 - r^2}{2kr}, \qquad \cos(rj) = \frac{j^2 + r^2 - k^2}{2rj},$$
$$\cos(kr) = \frac{j^2 - k^2 - r^2}{2kr}, \qquad \cos(jH) = \frac{m}{j}$$

и

$$\cos(kH) = \cos(jH)\cos(jk) - \sin(jH)\sin(jk)\cos\psi,$$
$$\cos(rH) = \cos(jH)\cos(jr) - \sin(jH)\sin(jr)\cos\psi.$$

В переменных II типа

$$\cos(rH) = \frac{p_r}{r}, \quad \cos(kH) = \frac{p_k}{k},$$
$$\cos(rk) = \cos(rH)\cos(kH) + \sin(rH)\sin(kH)\cos(\varphi_r - \varphi_k),$$

в силу чего

$$\frac{1}{h}H = (2p_r + p_k)\mathfrak{o}h + f\left(\frac{p_r}{r}\frac{p_k}{k} + \frac{\sqrt{r^2 - p_r^2}}{r}\frac{\sqrt{k^2 - p_k^2}}{k}\cos(\varphi_r - \varphi_k)\right) =$$
$$= (p_r + m)\mathfrak{o}h + f\left(\frac{p_r}{r}\frac{m - p_r}{k} + \frac{\sqrt{r^2 - p_r^2}}{r}\frac{\sqrt{k^2 - (m - p_r)^2}}{k}\cos\chi\right), \tag{6}$$

где $\chi = \varphi_r - \varphi_k$ — угловая переменная, канонически сопряженная с p_r.

Если ввести фазовые интегралы

$$\frac{1}{2\pi}\oint j\,d\psi = J, \quad \frac{1}{2\pi}\oint p_r\,d\chi = P_r,$$

то из (5) при $\mathfrak{o} \ll f$ (в слабом магнитном поле), как показывают простые соображения теории возмущений[13], сразу же следует, что

$$H = f\left(\frac{J^2 - K^2 - R^2}{2KR}\right) + \left(1 + \frac{J^2 + R^2 - K^2}{2J^2}\right)M\mathfrak{o}h + \mathfrak{o}^2, \tag{7}$$

а из (6) при $\mathfrak{o} \gg f$ (в сильном магнитном поле) —

$$H = (P_r + M)\mathfrak{o}h + \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\chi\, f\left(\frac{P_r}{R}\frac{M - P_r}{K} + \frac{\sqrt{(R^2 - P_r^2)[K^2 - (M - P_r)^2]}}{RK}\cos\chi\right). \tag{8}$$

Разумеется, для определения стационарных состояний оба фазовых интеграла J и P_r совершенно эквивалентны. Из общих теорем механики следует, что отличаться они могут лишь на целые кратные квантовых чисел M, R и K.

Нам не хотелось бы останавливаться на вопросе о соответствии между отдельными значениями J и P_r, поскольку он подробно разобран в работе Паули[14].

---

13) См., например, *Bohr N.* On the Quantum Theory of Line Spectra. Part II.

14) *Pauli W.* Zs. Phys., 1924, **20**, 371.

Чтобы применить схему вычислений из § 1 (равенство (3)), построим функцию

$$F = \int H\,dJ = \int H\,dP_r.$$

При $o \ll f$ из (7) получаем:

$$F = \int f\left(\frac{J^2 - K^2 - R^2}{2KR}\right) dJ + \left(J + \frac{J^2 + K^2 - R^2}{2J}\right) Moh, \tag{9}$$

а при $o \gg f$ из (8):

$$F = \left(MP_r + \frac{P_r^2}{2}\right) oh + \frac{1}{2\pi}\int dP_r \int\limits_0^{2\pi} d\chi\, f\left(\frac{P_r}{R}\frac{M - P_r}{K} + \right.$$
$$\left. + \frac{\sqrt{(R^2 - P_r^2)[K^2 - (M - P_r)^2]}}{RK}\cos\chi\right). \tag{10}$$

В частности, если взаимодействие между электроном и атомным остовом считать пропорциональным косинусу между R и K, то формулы (9) и (10) упрощаются:

$$F\left(\frac{J^2 - K^2 - R^2}{2KR}\right) = \omega\frac{J^2 - K^2 - R^2}{2KR}h;$$

при $o \ll \omega$

$$F = \frac{\frac{1}{3}J^2 - J\left(K^2 + R^2\right)}{2KR}\omega h + \left(J + \frac{J^2 + K^2 - R^2}{2J}\right) Moh, \tag{11}$$

при $o \gg \omega$

$$F = \left(MP_r + \frac{P_r^2}{2}\right) oh + \frac{P_r^2\left(M - \frac{2}{3}P_r\right)}{2RK}\omega h. \tag{12}$$

§ 3
Квантовотеоретическая интерпретация в соответствии с квантовым принципом из § 1 и сравнение с эмпирическими формулами

Сравнивая соотношения (1) и (7), нетрудно заметить, что формула (3) приводит к правильным значениям g, если для квантовых чисел K, R и M сохранить значения, приведенные Ланде, то есть положить

$$K = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \ldots$$

для s-, p-, d-, b-, … термов и

$$R = \frac{1}{2}, \frac{2}{2}, \frac{3}{2}, \frac{4}{2}, \ldots$$

для синглетных, дублетных, триплетных, квартетных,... систем. Однако квантовому числу J мы должны приписать вместо одного значения J_0, как это сделал Ланде, два значения $J_0 + \frac{1}{2}$, $J_0 - \frac{1}{2}$.

Например, для дублета $R = 1$ мы получили бы:

	s-терм		p_1-терм p_2-терм			d_1-терм d_2-терм		
R	1			1			1	
K	$\frac{1}{2}$			$\frac{3}{2}$			$\frac{5}{2}$	
J	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{7}{2}$	$\frac{5}{2}$	$\frac{3}{2}$

Возникающая при этом нормировка J и M обладает большим формальным преимуществом перед прежней нормировкой. Как известно, векторное сложение K и R с J приводит к неравенству

$$|K - R| \leqslant J \leqslant |K + R|. \tag{13}$$

Чтобы получить правильное число уровней (это достигалось либо подходящей нормировкой J, выбираемой с таким расчетом, чтобы $J_{\max} = \left|K + R - \frac{1}{2}\right|$, либо введением дополнительного запрета), прежде приходилось исключать из соотношения (13) знаки равенства, соответствующие параллельному расположению векторов. При нормировке Зоммерфельда[15] эти трудности не возникают, но в такой форме нормировка Зоммерфельда лишена модельной интерпретации, поскольку момент импульса основного состояния она ставит во взаимосвязь с моментом импульса возбужденного состояния.

Аналогичные трудности возникают и при нормировке M постольку, поскольку параллельное расположение векторов $M = J$ при прежней нормировке исключалось. Предлагаемое нами обобщение квантового принципа автоматически приводит к тому, что J может принимать все значения

$$K + R,\ K + R - 1,\ \ldots,\ |K - R|,$$

а M — все значения

$$J,\ J - 1,\ \ldots,\ -J,$$

как и следовало ожидать.

В § 1 мы показали, что число возможных уровней энергии на единицу меньше числа возможных значений J. Отсюда и получается правильное число расщепленных термов.

Поясним это на примере.

Рассмотрим p-терм триплетной системы, для которой выполняется закон косинуса и, следовательно, справедливы соотношения (11) и (12).

Тогда $R = \frac{3}{2}$, $K = \frac{3}{2}$ $(o \ll \omega)$:

p_1	$J = 3$	$-\omega h + \frac{9}{2}Moh$		
			$\frac{11}{27} + \frac{3}{2}Moh$	
p_1 / p_2	$J = 2$	$-\frac{38}{27}\omega h + 3Moh$		$\frac{24}{27}\omega h$
			$-\frac{13}{27} + \frac{3}{2}Moh$	
p_2 / p_3	$J = 1$	$-\frac{25}{27}\omega h + \frac{3}{2}Moh$		$\frac{12}{27}\omega h$
			$-\frac{25}{27} + \frac{3}{2}Moh$	
p_3	$J = 0$	$-0\omega h + 0Moh$		

[15] *Sommerfeld A.* Ann. d. Phys., 1923, **73**, 32; Zs. Phys., 1923, **24**, 360.

Соответствующие допустимые значения M ясны из следующей схемы:

$$\begin{array}{l|llllllllll}
 & J= & 3 & M= & -3 & -2 & -2 & 0 & +1 & +2 & +3 \\
p_1 & & \updownarrow & & & \updownarrow & \updownarrow & \updownarrow & \updownarrow & \updownarrow & \\
 & J= & 2 & M= & & -2 & -1 & 0 & +1 & +2 & \\
p_2 & & \updownarrow & & & & \updownarrow & \updownarrow & \updownarrow & & \\
 & J= & 1 & M= & & & -1 & 0 & +1 & & \\
p_3 & & \updownarrow & & & & & \updownarrow & & & \\
 & J= & 0 & M= & & & & 0 & & &
\end{array}$$

Отсюда вытекают следующие выводы: мы получаем, как и должно быть, три p-терма, причем для верхнего терма M может принимать значения, не превышающие 2, для среднего терма — не превышающие 1 и для самого нижнего терма — «не превышающие 0 ». Предложение о «законе косинуса» приводит к правильному отношению 2 : 1 интервалов $\Delta\nu$. Из формулы (11) следует предложенное Ланде обобщение закона пропорций интервалов на случай произвольного мультиплета.

Выбранная нами нормировка квантового числа P_r отличается от прежней и в более сильных полях. Параллельное расположение векторов $R \parallel H$ разрешено и в этом случае, P_r принимает следующие значения:

$$R,\ R-1,\ \ldots,\ -(R-1),\ -R.$$

§ 4

Принципы перманентности

Содержание так называемых суммационных теорем сводится к следующему утверждению:

сумма $\sum\limits_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} M_{qu}$ *линейна по* o *и* ω.

Покажем, что оно непосредственно следует из квантового правила, сформулированного в § 1.

Действительно, из (2) получаем:

$$\sum_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} H_{qu} = \int\limits_{J_{\min}}^{J_{\max}} H_{kl}\, dJ = \int\limits_{J_{\min}}^{J_{\max}}\int\limits_{0}^{1} H_{kl}\, dJ\, d\omega. \tag{14}$$

Здесь ω означает угловую переменную, канонически сопряженную с J. Если положить $\omega_0 = \frac{\psi}{2\pi}$, то согласно общим законам механики $dJ\, d\omega = dj\, d\omega_0$. Следовательно, интеграл (14) преобразуется в интеграл на плоскости $j\omega_0$, взятый по области[16] соответствующей прямоугольнику $J_{\max} \geqslant J \geqslant J_{\min}$, $1 \geqslant \omega \geqslant 0$. Выясним, на какую область плоскости $j\omega_0$ отображается этот прямоугольник. Особый выбор границ прямоугольника приводит к тому, (и это существенно важный пункт приводимого нами доказательства), что область $J_{\max} \geqslant J \geqslant J_{\min}$, $1 \geqslant \omega \geqslant 0$ отображается на область, также имеющую форму прямоугольника $j_{\max} \geqslant j \geqslant j_{\min}$, $1 \geqslant \omega_0 \geqslant 0$. Действительно, из (5) следует, что $j = j_{\max} = \text{const}$ и $j = j_{\min} = \text{const}$ — решения

[16] Этим замечанием я обязан проф. Борну, которому мне хотелось бы выразить признательность ı многие другие ценные советы.

уравнений движения, поскольку при $j = j_{\max} = k + r$ и $j = j_{\min} = |k - r|$ (и ` \ множитель, стоящий в (5) при косинусе, обращается в нуль, в силу чего

$$\frac{dj}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \psi} = 0.$$

Следовательно, границы $J = J_{\max}$ и $J = J_{\min}$ при отображении переходят в прямые $j = j_{\max}$ и $j = j_{\min}$. То, что весь прямоугольник $J_{\max} \geqslant J \geqslant J_{\min}$, $1 \geqslant \omega \geqslant 0$ отображается на весь прямоугольник $j_{\max} \geqslant j \geqslant j_{\min}$, $1 \geqslant \omega_0 \geqslant 0$, следует просто из того, что при произвольном поле каждая точка последнего прямоугольника соответствует некоторому вещественному значению энергии и, таким образом, некоторому возможному движению. Из (5) и (14) получаем

$$\sum_{J=J_{\min}}^{J_{\max}} H_{qu} = \int\limits_{J_{\min}}^{J_{\max}}\int\limits_{0}^{1} H_{kl}\, dJ\, d\omega = \int\limits_{j_{\min}}^{j_{\max}} H_{kl}\, dj\, d\omega_0 =$$

$$= moh \int\limits_{j_{\min}}^{j_{\max}} dj \left(1 + \frac{j^2 - k^2 + r^2}{2j^2}\right) + h \int\limits_{j_{\min}}^{j_{\max}} dj\, f\left(\frac{j^2 - k^2 + r^2}{2kr}\right). \qquad (15)$$

Сумма (14) действительно линейна по o и ω. Причина суммационных теорем носит не физический, как предполагал автор ранее, а *математический* характер. Она существенно связана с тем обстоятельством, что предельные значения J, M или P_r соответствуют параллельному расположению векторов. Отсюда особенно отчетливо видно, что искусственное исключение из рассмотрения случаев параллельного расположения векторов противоречило бы физическому существу проблемы.

Приведенное выше доказательство суммационных теорем привело нас к формально очень простому и полному описанию аномального эффекта Зеемана, характеризуемого в слабых полях формулами Ланде. Практически прогресс достигнут лишь настолько, насколько нам позволяют продвинуться соотношения (3), (6) и (10). То же относится и к расчету расщепления линий в средних магнитных полях.

§ 5

Физическая интерпретация формализма, изложенного в § 1

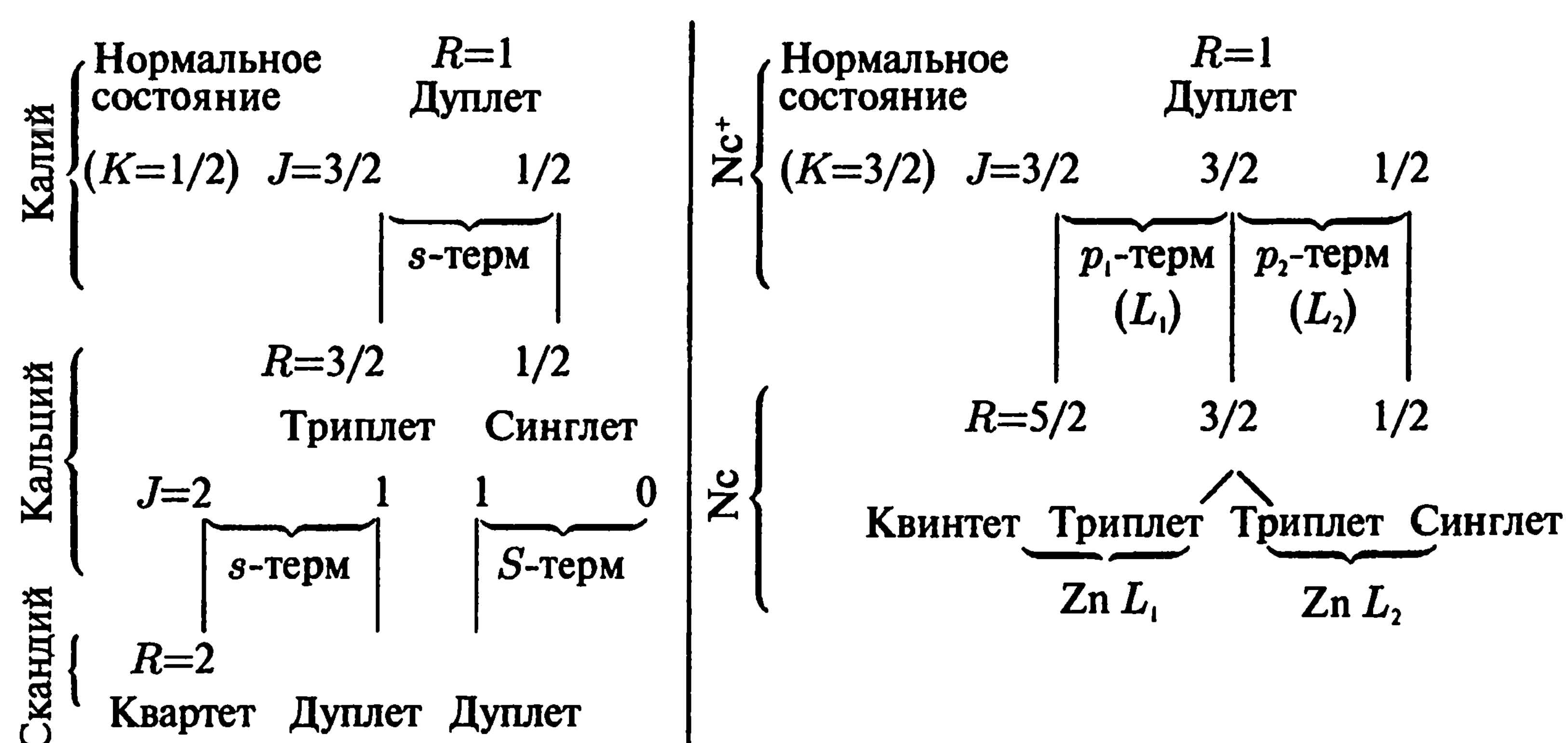
Насколько сильно формальное упрощение, вносимое квантовым правилом из § 1 в проблему эффекта Зеемана, настолько неясен его физический смысл. То, что *одно* значение энергии связи формально соответствует *двум* квантовым числам J, а одно квантовое число J — двум значениям энергии связи, на первый взгляд кажется своеобразным «ходом» теории, особенно чуждым сложившимся ранее представлениям. Однако не исключена возможность, что формальная аналогия между соотношением (3) и условием частот впоследствии позволит прийти к определенной физической точке зрения относительно интерпретации § 1, в то время как проблема связи между электронами тесно связана с теорией излучения, что обязывает нас при рассмотрении связи учитывать взаимодействия, обуславливающие возможность перехода из одного стационарного состояния в другое. Возможна и обратная ситуация: правило из § 1, пригодное в том виде, как оно приведено в нашей работе, лишь для решения проблем аномального эффекта Зеемана, может указать направление модификации существующей механики и создания квантовой механики систем с несколькими электронами.

Предварительный характер приведенных выше вычислений особенно ясно виден из того, что мы вместо обычной механики вынуждены использовать эрзац-модель. В окончательный вариант теории эффекта Зеемана немеханические свойства нашей эрзац-модели, а также формулы для g-фактора Ланде из § 3 должны следовать из квантовой механики, в число требований которой будет входить сохранение устойчивости и при связи электронов. Для достижения этой цели пока не сделано ни шага. Однако можно предположить, что принципиальные трудности на пути к интерпретации полуцелых квантовых чисел, формулы релятивистского дублета и двойного магнетизма проистекают из того же источника, к которому восходит модификация квантовой механики, связанная с введением формулы для g из § 1.

В том, что это действительно так, нас убеждают вполне отчетливые признаки. Например, «целочисленность» расщепления линий при эффекте Пашена—Бака (при целом M) обусловлена применением схемы из § 1 к полуцелым значениям P_r. Столь неудовлетворительные с теоретической точки зрения полуцелые значения K предстают в новом свете в результате исследований Ланде[17], установившего, что уровни p_1 и p_2, судя по всем их магнитным свойствам, должны быть нормированы на $K = 3/2$ и образовывать в видимой (так же, как и в рентгеновской) части спектра релятивистский дублет, соответствующий значениям $K = 2$ и $K = 1$.

Что касается двойного магнетизма, то следует обратить внимание на следующее обстоятельство: как показано в § 3, введение электрона с $K = 1/2$ не изменяет фактор магнетизма, равный 2, так как все s-термы и атомный остаток по-прежнему обладают значением g, равным 2.

Физическая интерпретация квантового правила из § 1 играет существенную роль и при рассмотрении принципа строения. Строгое обоснование необычного поведения статистических весов (см. введение) и различных вариантов допустимого расположения векторов момента импульса при связи должно исходить из разумного обобщения правила из § 1 на системы с несколькими электронами и исследования числа возможных конфигураций векторов. Эта задача для сильных магнитных полей рассмотрена в § 6. Однако предварительно мы можем указать схему, показывающую чисто формально естественную взаимосвязь принципа строения и квантового правила из § 1. Хотя и в этом случае мы сначала вынуждены отказаться от физической интерпретации, тем не менее предлагаемая схема показывает, что квантовое правило из § 1 почти с необходимостью приводит к законам строения, предложенным недавно Ланде, а также автором в данной статье.



[17] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **15**, 189; Zs. Phys., 1923, **19**, 112; Zs. Phys., 1923, **16**, 391; Naturwiss., 1924, **12**, 332.

«Правило ветвления», о котором шла речь в работе[18], эквивалентно правилу из § 1. Однако подлинное обоснование принципа строения, сводящее объяснение поведения статистических весов непосредственно к квантовомеханическим эффектам, становится возможным лишь при рассмотрении систем с несколькими электронами.

§ 6
Несколько внешних электронов

Разумное обобщение принципа из § 1 на случай нескольких электронов до сих пор удавалось построить лишь в простейшем случае очень сильных магнитных полей, т. е. очень слабой связи. В § 2 мы описывали атом в случае слабой связи величинами r, k, m и p_k, где p_k — проекция k на H. Если у атома имеется несколько внешних электронов, то их мы, естественно, будем описывать величинами

$$r, k_1, k_2, \ldots, k_n, m \quad \text{и} \quad p_{k_1}, p_{k_2}, \ldots, p_{k_n},$$

где $k_1, k_2, \ldots, k_3$ — моменты импульсов электронов, $p_{k_1}, p_{k_2}, \ldots, p_{k_n}$ — их проекции на H. Квантовотеоретическая энергия H_{qu} возникает в этом случае при «одновременном» усреднении по $P_{k_1}, P_{k_2}, \ldots, P_{k_n}$ (подобно тому, как в случае одного внешнего электрона мы получали ее при усреднении по p_k). «Одновременность» здесь означает, что мы усредняем по прямой, проведенной в пространстве $P_{k_1}, \ldots, P_{k_n}$ через точки $P^0_{k_1}, P^0_{k_2}, \ldots, P^0_{k_n}$ и, например, $P^0_{k_1}+1, P^0_{k_2}+1, \ldots, P^0_{k_n}+1$, т. е. по пространственной диагонали n-мерного куба $P_{k_1}, \ldots, P_{k_n}$; $P_{k_1}+1, P_{k_2}, \ldots, P_{k_n}$; …; $P_{k_1}+1$, $P_{k_2}+1, \ldots, P_{k_n}+1$.

Нетрудно показать, что при таком обобщении принципа из § 1 мы получаем не только правильное число термов, соответствующее требованиям принципа строения, но и правильную картину расщепления термов в сильных магнитных полях. Обратимся в качестве примера к случаю, в котором из атома с квартетным s-термом в основном состоянии при добавлении одного электрона получается атом с квинтетной и триплетной системой, и рассмотрим d-термы такой системы. У нас имеется атомный остаток с $R = 2$ и двумя внешними электронами $K_1 = 1/2$, $K_2 = 5/2$. Классическая энергия в случае сильных полей согласно (6) ($f = 0$) определяется выражением

$$H_{kl} = (2M - P_{k_1} - P_{k_2})oh, \tag{16}$$

следовательно, квантовотеоретическую энергию можно представить в виде

$$H_{qu} = (2M - \bar{P}_{k_1} - \bar{P}_{k_2})oh. \tag{17}$$

Проведем границы рассматриваемой области на плоскости $P_{k_1}P_{k_2}$: величина P_{k_1} должна быть заключена между $+1/2$ и $-1/2$, величина P_{k_2} — между $+5/2$ и $-5/2$. Кроме того, поскольку $R = 2$, то при заданном значении M возникают границы $P_{k_1} + P_{k_2} = M + 2$ и $P_{k_1} + P_{k_2} = M - 2$. На рис. 1 эти границы изображены при $M = 1$. Лежащие в рассматриваемой области диагонали проведены на рис. 1 толстыми линиями. Таким образом, при $M = 1$ мы получаем четыре терма квинтетной системы, которым соответствуют диагонали, идущие сверху слева направо вниз. Как следует из соотношения (17), они связаны с расщеплением

$$\frac{1}{o \cdot h} H_{qu} = 3, 2, 1, 0.$$

[18] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **16**, 391; Naturwiss., 1924, **12**, 332.

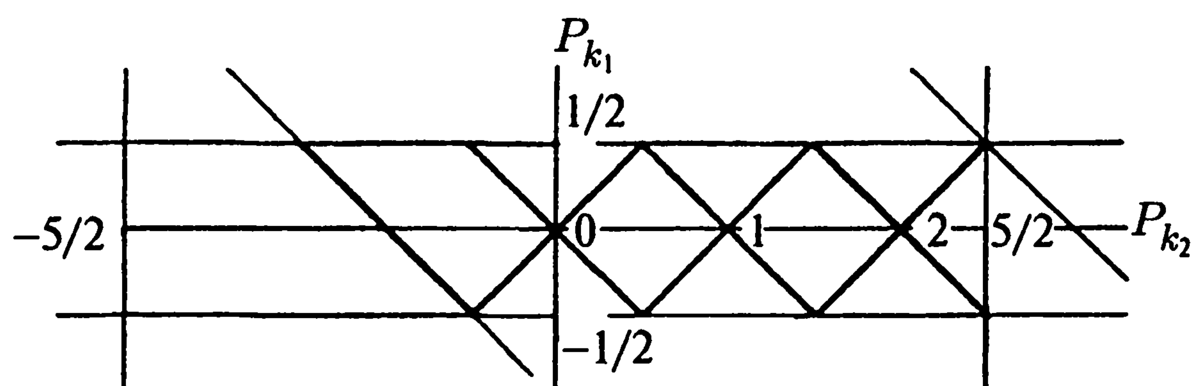


Рис. 1. $K_1 = \frac{1}{2}$, $K_2 = \frac{5}{2}$, $M = 1$

Кроме того, мы получаем три терма триплетной системы, которым соответствуют диагонали, идущие сверху вниз справа налево. Они связаны с расщеплением

$$\frac{1}{o \cdot h} H_{qu} = 2, 1, 0.$$

Если провести аналогичные вычисления для других значений M (например, сдвинуть наклонные границы допустимой области на отрезок, соответствующий новому значению M), то результат окажется следующим:

		$M = 0$	1	2	3	4
$\frac{1}{oH}$	Квинтет	2, 1, 0, −1, −2	3, 2, 1, 0	4, 3, 2	5, 4	6
	Триплет	1, 0, −1	2, 1, 0	3, 2	4	—

Полученные значения полностью совпадают с найденными Паули[19] для расщепления в сильных полях.

Итак, обобщение принципа из § 1 на случай нескольких внешних электронов не представляет никаких трудностей. Тем не менее, в приведенной выше форме это обобщение нельзя признать удовлетворительным, поскольку прежде всего оно не позволяет объяснить ни причины, по которым справедливы принципы суммирования, ни расщепление в слабых полях. Однако нам кажется весьма естественным, что искать объяснение последнего из названных выше пунктов надлежит в тесной связи с решением всех прочих принципиальных трудностей аномального эффекта Зеемана и что существенную роль при этом играет физическая интерпретация § 1. Мы изложили приведенное выше обобщение § 1, чтобы показать, насколько тесно принцип строения связан с соответствием между двумя квантовыми числами и одним значением энергии связи и, кроме того, развить формализм, позволяющий (что имеет практическое значение) вычислять расщепление линий в сильных полях для всех типов мультиплетов. Что же касается принципа строения, то мы снова приходим именно к тем классам мультиплетов, которые недавно были рассмотрены Ланде и автором.

§ 7
Спектр неона

В качестве непосредственного приложения точки зрения, изложенной в предыдущем разделе, рассмотрим спектр неона, проанализированный Пашеном[20] и теоретически классифицированный Ланде[21]. Атомный остов возбужденного

---

[19] *Pauli W.* Zs. Phys., 1924, **20**, 371.

[20] *Paschen F.* Ann. d. Phys., 1919, **60**, 405; 1920, **63**, 201.

[21] *Landé A.* Zs. Phys., 1923, **17**, 292.

неона обладает состояниями L_1 и L_2[22], которые Ланде[23] отождествил с p_1 и p_2. Следовательно, принцип строения приводит к следующей схеме:

$$J_{\text{атомный остов}} = \underbrace{\tfrac{1}{2} \qquad \tfrac{3}{2}}_{L_1} \quad \underbrace{\tfrac{3}{2} \qquad \tfrac{5}{2}}_{L_2}$$

Класс мультиплета атома: $\overbrace{\text{Синглет–Триплет}}^{L_1}$ $\overbrace{\text{Триплет–Квинтет}}^{L_2}$

Все термы, указанные этой схемой, и их расщепление в сильных полях описывает обобщение принципа из § 1.

Особенно просто выглядят соотношения для s-термов неона. Действительно, в случае эффекта Зеемана, очевидно, безразлично, является ли электрон с $k = 3/2$ внутренним, а электрон с $k = 5/2$ внешним или наоборот. Следовательно, s-термы неона в точности соответствуют p-термам щелочноземельных элементов, т. к. у последних внутренний электрон обладает $k = 1/2$, а внешний $k = 3/2$. Таким образом, мы приходим к необходимости предположить, что не только в сильных, но и в слабых магнитных полях четыре s-терма ведут себя точно так же, как, например, четыре p-терма магния (в частности, имеют одни и те же значения g). Именно это и наблюдается в эксперименте. Однако если говорить о пропорциях интервалов, то магний (p-термы) и неон (s-термы) обладают различными свойствами, поскольку силы связи значительно расходятся. Сравним s-термы неона с p-термами магния, расположив для удобства те и другие в виде следующей таблицы:

		L_1		L_2	
Неон	Система термов	Квинтет–Триплет		Триплет–Синглет	
	Терм	s_5	s_4	s_2	s_3
	Значение g	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	$\frac{0}{0}$
	M_{max}	2	1	1	0

Магний	Система термов	Триплет			Синглет
	Терм	p_1	p_2	p_3	p
	Значение g	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{0}{0}$	1
	M_{max}	2	1	0	1

Для высших уровней (p-, d-, …) неона мы также ничего не говорим о реально наблюдаемых расстояниях между уровнями квинтет-триплетной и триплет-синглетной систем, встречающихся, например, у магния или у хрома, марганца, железа: приведенная выше классификация описывает лишь простую схему распределения значений J. Свойства распределения полностью соответствуют тому, что следует ожидать из теоретических соображений. Справедливость «закона косинуса» представляет собой характерное исключение для «мультиплета первой ступени» (внутренний электрон на s-орбите), обоснованием которого мы пока не располагаем. Не исключено, однако, что возможную причину кажущегося исчезновения взаимодействия, проявляющегося прежде всего в больших квадрупольных членах, нам удастся извлечь из принципа, изложенного в § 1 и из § 6. Если из двух валентных

[22] *Grotian*. Zs. Phys., 1922, **8**, 116.

[23] *Landé A*. Zs. Phys., 1923, **16**, 391.

электронов внутренний находится на s-орбите с $k_1 = 1/2$, то из схемы усреднения, приведенной в §6, следует, что вектор k_1 усредняется по всем допустимым положениям $-1 \leqslant \cos(k_1 H) \leqslant +1$. Отсюда можно сделать вывод, состоящий в том, что, взаимодействуя с внешним электроном, внутренний электрон ведет себя, как *сферически симметричный* потенциал. Пользуясь схемой усреднения, приведенной на рис. 1, нетрудно показать, что этот сферически симметричный эрзац-потенциал одинаков для диагоналей, идущих в одном и том же направлении, и, следовательно, сильное взаимодействие между внешним и внутренним валентными электронами проявляется лишь в значительном различии величины термов триплетной и квинтетной систем и что малая ширина расщепления в каждой мультиплетной системе не связана с усреднением взаимодействия.

Если внутренний электрон движется не по s-орбите, то мы не можем ожидать, что будет выполняться закон косинуса, и нам не остается ничего другого, как предположить, что интервалы между всеми термами имеют один и тот же порядок величины. Мы отнюдь не можем требовать, чтобы значения g были рациональными и однозначно определялись структурой мультиплета. Нам следует предположить, что в значения g входит отношение связи, подобно тому, как, например, p-термы характеризуются отношением $\frac{L_1-L_2}{p_i-p_k}$. Отсюда следовало бы, что в рассматриваемом нами случае правило Престона, согласно которому значения g не зависят от главного квантового числа, перестает действовать.

Все эти утверждения справедливы даже если ограничиться рассмотрением связи между векторами момента импульса, то есть связи между электронами, усредненными по всей розетке орбит. Однако для неона связь между электронами оказывается, по-видимому, столь сильной, что, как показывает принцип отбора (см. §8), нельзя пренебрегать даже периодическими противоположно направленными возмущениями электронов. Связь этого типа в конечном счете нарушает рациональность значений g и для s-термов. В общем случае необходимо предположить, что и для мультиплетов первой ступени значения g рациональны лишь с такой точностью, с какой можно считать пренебрежимо малыми возмущения орбит, вызываемые связью.

§8
Принцип отбора

Формальный прогресс, достигнутый введением правил из §1 и §6, мы усматриваем в утверждении о том, что, например, у щелочных земель и синглетная, и триплетная системы обусловлены одной и той же энергией связи, принадлежащей атомному остатку. Прямое отношение к этому имеет тот факт, что у обоих мультиплетных систем совпадают границы серий и комбинационные линии между триплетом и синглетом имеют ту же интенсивность, как и линии каждого из мультиплетов.

Наше замечание позволяет также понять некоторые экспериментальные данные (например, по марганцу[24]) и железу[25])), свидетельствующие о том, что комбинационные линии возникают главным образом между какими-нибудь двумя мультиплетными системами, в то время как комбинационные линии, соответствующие другим мультиплетным системам, выпадают. Разумеется, окончательный ответ на затронутые нами вопросы будет получен лишь после того, как удастся выяснить квантовотеоретический механизм связи.

Правила из §1 и §6 не оказывают влияния на вычисление интенсивностей по принципу соответствия[26]).

---

24) *Back E.* Ann. d. Phys., 1923, **70**, 333; Zs. Phys., 1923, **15**, 206.

25) *Laporte O.* Zs. Phys., 1924, **23**, 135.

26) *Landé A.* Zs. Phys., 1922, **5**, 231 (5); *Sommerfeld A., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1922, **11**, 131.

Заключительные замечания

Содержание настоящей работы сводится к следующему: показано, что простое изменение формальных квантовых правил позволяет описывать структуру мультиплетов и эффект Зеемана проще и с несколько более близкой к единой точки зрения, чем существовавшие ранее правила. В частности, закон перманентности и правила строения вряд ли можно интерпретировать иначе, чем приняв предположение о том, что одному значению энергии связи соответствуют два квантовых числа. Что же касается физического смысла предложенного нами формализма, то можно предположить следующее. Правило из § 1 отражает тот факт, что квантовомеханическое взаимодействие между атомами и полями излучения, полностью аналогичное взаимодействиям связи, связано с возможностью перехода из одного стационарного состояния в другое. В этом смысле можно предположить, что формализм, аналогичный изложенному в § 1 и § 6, играет в квантовой механике взаимодействий связи общую роль, выходящую за рамки проблемы эффекта Зеемана.

О КВАНТОВОТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ КИНЕМАТИЧЕСКИХ И МЕХАНИЧЕСКИХ СООТНОШЕНИЙ*

В работе предпринимается попытка построить основы квантовотеоретической механики, базирующейся исключительно на соотношениях между принципиально наблюдаемыми величинами.

Как известно, против формальных правил, широко используемых в квантовой теории при вычислении наблюдаемых величин (например, энергии атома водорода), выдвигается веское возражение, что существенную составную часть этих правил образуют соотношения, содержащие такие величины (как, например, координаты, период обращения электрона), которые, по-видимому, принципиально не могут быть наблюдаемыми, т. е. что в этих правилах отсутствует какое-либо наглядное физическое обоснование, если только мы не будем питать надежды, что эти ненаблюдаемые теперь величины когда-нибудь позднее станут доступными опыту. Эти надежды можно было бы считать обоснованными, если бы упомянутые правила были внутренне непротиворечивыми и имели четко очерченную область применения к квантовотеоретическим проблемам.

Однако опыт показывает, что указанным формальным правилам квантовой теории подчиняется только атом водорода, а также эффект Штарка в этом атоме, но что уже в проблеме «скрещенных полей» (атом водорода в электрическом и магнитном полях различного направления) обнаруживаются трудности фундаментального характера, что эти правила, наверное, не могут быть применимы к задаче о влиянии периодических переменных полей на атомы и, наконец, что распространить эти правила на атомы с несколькими электронами оказалось невозможным. Стало обычным называть отклонением от классической механики указанную выше несостоятельность правил квантовой теории, хотя сами они существенно характеризуются именно применением классической механики. Однако термин «отклонение» едва ли можно считать правомерным, особенно если принять во внимание, что уже условие частот Эйнштейна—Бора (которое действует без каких-либо ограничений) означает настолько полный отказ от классической механики или, лучше сказать с позиций волновой теории, от кинематики, положенной в основу механики, что даже при решении простейших задач квантовой теории о применимости классической механики не может быть и речи. При этих обстоятельствах, по-видимому, лучше совсем отказаться от надежд на то, что ненаблюдаемые сегодня величины (например, координаты и период обращения электрона) станут наблюдаемыми; одновременно следует признать, что частичное согласие указанных выше квантовых правил с опытом носит более или менее случайный характер и потому имеет

---

* Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. — Zs. Phys., 1925, **33**, 879–893. *Перевод А. А. Сазыкина.*

смысл попытка построить квантовую механику, аналогичную классической механике. Наряду с условием частот в качестве важнейших исходных положений такой квантовой механики можно взять дисперсионную теорию Крамерса [1] и основанные на этой теории результаты позднейших работ [2]. Ниже мы постараемся получить некоторые новые квантовомеханическме соотношения, чтобы использовать их для полного рассмотрения некоторых частных задач. При этом мы будем ограничиваться задачами с одной степенью свободы.

§1

В классической теории излучение движущегося электрона (в волновой зоне, т. е. $\mathfrak{E} \sim \mathfrak{H} \sim \frac{1}{r}$) определяется не только формулами

$$\mathfrak{E} = \frac{e}{r^3c^2}[\mathfrak{r}[\mathfrak{r}\dot{\mathfrak{v}}]],$$
$$\mathfrak{H} = \frac{e}{r^2c^2}[\dot{\mathfrak{v}}\mathfrak{r}],$$

но и появляющимися в них в следующем приближении слагаемыми, например, вида

$$\frac{e}{rc^3}\dot{\mathfrak{v}}\mathfrak{v},$$

которые могут быть названы «квадрупольным излучением»; в еще более высоком приближении добавляются слагаемые вида, например

$$\frac{e}{rc^4}\dot{\mathfrak{v}}\mathfrak{v}^2.$$

Аналогичным образом можно получать приближение сколь угодно высокого порядка. (Выше были использованы следующие обозначения: $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{H}$ — напряженности поля в точке наблюдения, e — заряд электрона, $\mathfrak{r}$ — расстояние до электрона от точки наблюдения, $\mathfrak{v}$ — скорость электрона.)

Можно поставить вопрос о том, как должны выглядеть указанные слагаемые более высокого порядка в квантовой теории. Поскольку в классической теории высшие приближения вычисляются просто при условии, что движение электрона или его Фурье-разложение задано, то в квантовой теории следует ожидать чего-то аналогичного. Этот вопрос не имеет ничего общего с электродинамикой, но, что представляется нам особенно важным, носит чисто *кинематический* характер; в простейшем виде мы можем сформулировать его следующим образом. Пусть задана некоторая квантовомеханическая величина, заменяющая классическую величину $x(t)$; какая квантовотеоретическая величина будет тогда заменять $x(t)^2$?

Прежде, чем ответить на этот вопрос, мы должны вспомнить о том, что в квантовой теории было невозможно сопоставить электрону точку в пространстве как функцию времени с помощью наблюдаемых величин. Тем не менее электрону и в квантовой теории можно сопоставить излучение; оно может характеризоваться, во-первых, частотами, которые зависят от двух переменных и имеют функциональную форму в квантовой теории

$$\nu(n, n-\alpha) = \frac{1}{h}\{W(n) - W(n-\alpha)\},$$

[1] *Kramers H. A.* Nature, 1924, **113**, 673.

[2] *Born M.* Zs. Phys., 1924, **26**, 379; *Kramers H. A., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **31**, 681; *Born M., Jordan P.* Zs. Phys., 1925, **33**, 479.

в классической теории

$$\nu(n, \alpha) = \alpha\nu(n) = \alpha\frac{1}{h}\frac{dW}{dn}.$$

(Здесь произведена замена одной из канонических постоянных по формуле $nh = J$.)

Характеристические (в смысле сравнения классической теории с квантовой) комбинационные соотношения для частот имеют вид:

в классической теории

$$\nu(n, \alpha) + \nu(n, \beta) = \nu(n, \alpha + \beta);$$

в квантовой теории

$$\nu(n, n - \alpha) + \nu(n - \alpha, n - \alpha - \beta) = \nu(n, n - \alpha - \beta)$$

или

$$\nu(n - \beta, n - \alpha - \beta) + \nu(n, n - \beta) = \nu(n, n - \alpha - \beta).$$

Во-вторых, наряду с частотами для описания излучения необходимо знать амплитуды, которые определяют поляризацию и фазу; амплитуды могут быть представлены в форме комплексных векторов (каждый их которых имеет шесть независимых определяющих параметров). Амплитуды также зависят от двух переменных n и α, так что соответствующая часть излучения может быть представлена в следующем виде:

в квантовой теории

$$\text{Re}\left\{\mathfrak{A}(n, n-\alpha)e^{i\omega(n,n-\alpha)t}\right\}, \tag{1}$$

в классической теории

$$\text{Re}\left\{\mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t}\right\}. \tag{2}$$

В квантовой теории фаза (содержащаяся в $\mathfrak{A}$) на первый взгляд не имеет физического смысла, так как в этой теории частоты в общем случае не соизмеримы со своими обертонами. Однако мы сейчас увидим, что фаза и в квантовой теории имеет примерно такой же смысл, как и в классической теории. Рассматривая некоторую определенную величину $x(t)$ в классической теории, мы можем полагать, что она представляется совокупностью величин вида

$$\mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t},$$

объединение которых в сумму или интеграл, в зависимости от того, будет движение периодическим или нет, дает представление $x(t)$:

$$x(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t},$$

или

$$x(n, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\alpha t}\, d\alpha. \tag{2a}$$

Аналогичное естественное объединение квантовых величин в силу равноправности величин n, $n - \alpha$ кажется невозможным и потому не имеющих смысла; тем не менее величину $x(t)$ можно представить в виде совокупности величин

$$\mathfrak{A}(n, n-\alpha)e^{i\omega(n,n-\alpha)t},$$

после чего можно попытаться ответить на поставленный вопрос: какое представление будет иметь величина $x^2(t)$?

В классической теории мы получим, очевидно, следующий ответ:

$$\mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t}, \tag{3}$$

или

$$\mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t}\, d\alpha, \tag{4}$$

причем тогда

$$x(t)^2 = \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} \mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t} \tag{5}$$

или

$$\mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t}\, d\beta. \tag{6}$$

В квантовой теории самая простая и наиболее естественная гипотеза состоит в том, чтобы заменить соотношения (3)–(4) на следующие

$$\mathfrak{B}(n, n-\beta)e^{i\omega(n,n-\beta)t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{A}(n-\alpha, n-\beta)e^{i\omega(n,n-\beta)t} \tag{7}$$

или

$$\mathfrak{B}_\beta(n)e^{i\omega(n)\beta t} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{A}(n-\alpha, n-\beta)e^{i\omega(n,n-\beta)t}; \tag{8}$$

и при этом соотношение такого вида выглядит как почти неизбежное следствие комбинационных соотношений для частот. Принимая эту гипотезу (7) и (8), мы видим, что фазы амплитуды $\mathfrak{A}$ в квантовой теории имеют точно такой же физический смысл, как в классической теории: произвольной и лишенной физического смысла можно считать начальную точку отсчета времени, а с ней и *общую* для всех $\mathfrak{A}$ фазовую постоянную; однако фаза *отдельных* $\mathfrak{A}$ существенно входит в величину $\mathfrak{B}$ [3]. Геометрическая интерпретация таких квантовых фазовых соотношений по аналогии с классической теорией пока представляется едва ли возможной.

Если мы зададим далее вопрос о представлении величины $x^3(t)$, то без труда найдем:

в классической теории

$$\mathfrak{C}(n,\gamma) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \sum_{\beta=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)\mathfrak{A}_\beta(n)\mathfrak{A}_{\gamma-\alpha-\beta}(n); \tag{9}$$

[3] См. также: *Kramers H.A., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **31**, 681. В используемые там формулы для индуцированного момента рассеяния существенно входят фазы.

в квантовой теории

$$\mathfrak{C}(n, n-\gamma) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \sum_{\beta=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{A}(n-\alpha, n-\alpha-\beta)\mathfrak{A}(n-\alpha-\beta, n-\gamma), \quad (10)$$

или вместо сумм соответствующие интегралы.

Аналогичным способом могут быть представлены в квантовой теории все величины вида $x^n(t)$, и если дана какая-нибудь функция $f[x(t)]$, то для нее, очевидно, всегда можно найти квантовотеоретический аналог при условии, что эта функция разлагается в степенной ряд по x. Однако существенная трудность возникает, если мы будем рассматривать две величины $x(t)$, $y(t)$ и их произведение $x(t)y(t)$.

Если $x(t)$ характеризуется амплитудой $\mathfrak{A}$, а $y(t)$ — амплитудой $\mathfrak{B}$, то представление $x(t)y(t)$ принимает вид:

в классической теории

$$\mathfrak{C}_\beta(n) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)\mathfrak{B}_{\beta-\alpha}(n),$$

в квантовой теории

$$\mathfrak{C}(n, n-\beta) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \mathfrak{A}(n, n-\alpha)\mathfrak{B}(n-\alpha, n-\beta).$$

В то время как в классической теории произведение $x(t)y(t)$ всегда равно $y(t)x(t)$, в квантовой теории в общем случае это вовсе необязательно. В частных же случаях, например, при образовании $x(t) \cdot x(t)^2$, указанная трудность не появляется.

Если, как это было сделано в начале этого параграфа, поставить вопрос об образовании произведения вида

$$v(t)\dot{v}(t),$$

то $v\dot{v}$ в квантовой теории следует заменить на $(v\dot{v} + \dot{v}v)/2$ для того, чтобы получить производную $v^2/2$ по времени. Аналогичным образом, вероятно, всегда можно вычислять естественные квантовые средние величины, которые, однако, выглядят гипотетическими в еще большей степени, нежели формулы (7) и (8).

Несмотря на только что изложенные трудности, формулы типа (7), (8) могли бы быть вообще достаточными и для того, чтобы определять взаимодействие электронов в атоме с помощью характеристических амплитуд электронов.

§2

После этого рассмотрения, предметом которого была кинематика квантовой теории, мы перейдем к задаче механики об определении величин $\mathfrak{A}$, ν, W при условии, что известны силы, действующие в системе. В существующей теории эта задача решается в два этапа:

1. Интегрирование уравнения движения

$$\ddot{x} + f(x) = 0. \quad (11)$$

2. Определение константы при периодическом движении из условия

$$\oint p\,dq = \oint m\dot{x}\,dx = J(= nh). \quad (12)$$

Если мы беремся за построение квантовотеоретической механики, по возможности аналогичной классической механике, то наиболее естественным представляется сохранение уравнения движения (11) и в квантовой теории, причем для того, чтобы не сходить с твердой почвы принципиально наблюдаемых величин, необходимо только заменять величины $\ddot{x}$, $f(x)$ на их квантовые аналоги, известные из § 1. В классической теории решение уравнения (11) можно искать в форме разложения x в ряд (или интеграл) Фурье с неопределенными коэффициентами (и частотами); правда, при этом мы получаем в общем случае бесконечно много уравнений с бесконечно большим числом неизвестных или интегральные уравнения, которые лишь в частных случаях могут быть сведены к простым рекуррентным формулам для $\mathfrak{A}$. В квантовой теории мы все-таки вынуждены пока искать решение уравнения (11) в указанной форме, поскольку, как было уже сказано, функция $x(n,t)$ не допускает непосредственного определения аналогичной ей квантовотеоретической функции.

Это приводит к тому, что квантовотеоретическое решение уравнения (11) можно получить прежде всего только в простейших случаях. Прежде чем перейти к таким простым примерам, мы рассмотрим еще квантовотеоретическое определение константы по условию (12). Итак, мы предполагаем, что в классической механике мы имеем периодическое движение

$$x = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} a_\alpha(n) e^{i\alpha\omega_n t}; \tag{13}$$

тогда

$$m\dot{x} = m \sum_{-\infty}^{+\infty} a_\alpha(n) i\alpha\omega_n e^{i\alpha\omega_n t}$$

и

$$\oint m\dot{x}\,dx = \oint m\dot{x}^2\,dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} a_\alpha(n) a_{-\alpha}(n) \alpha^2 \omega_n.$$

Учитывая, что $a_{-\alpha} = \overline{a_\alpha}$, т. е. что величина x должна быть вещественной, мы находим

$$\oint m\dot{x}^2\,dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} |a_\alpha(n)|^2 \alpha^2 \omega_n. \tag{14}$$

Этот фазовый интеграл до сих пор считали в большинстве случаев равным целочисленному кратному h, т. е. равным nh; однако это условие выглядит не только совершенно чуждым механике, но и произвольным даже с точки зрения смысла принципа соответствия; ведь по принципу соответствия величина J принимает целочисленные кратные значения h только с точностью до произвольной постоянной, и вместо условия (14) более естественно было бы предполагать

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn} \oint m\dot{x}^2\,dt,$$

т. е.

$$h = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{d}{dn}\left(\alpha\omega_n |a_\alpha|^2\right). \tag{15}$$

Конечно, такое условие определяет тогда все значения a_α только с точностью до некоторой постоянной, и эта неопределенность должна приводить к трудностям в связи с обнаружением на опыте полуцелых квантовых чисел.

Если мы зададим вопрос о квантовотеоретическом соотношении между наблюдаемыми величинами, соответствующем условиям (14) и (15), то утраченная однозначность восстановится сама собой.

Хотя только уравнение (15) может быть преобразовано в простое квантовотеоретическое соотношение[4)], примыкающее к дисперсионной теории Крамерса,

$$h = 4\pi m \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left\{ |a(n, n+\alpha)|^2 \omega(n, n+\alpha) - |a(n, n-\alpha)|^2 \omega(n, n-\alpha) \right\}, \qquad (16)$$

однако это соотношение оказывается здесь достаточным для однозначного определения величин a; ведь имеющаяся в величинах a вначале неизвестная постоянная определяется сама собой условием, что должно существовать нормальное состояние, в котором излучение уже не происходит; следовательно, если для нормального состояния ввести обозначение n_0, то для всех $\alpha > 0$ должно быть

$$a(n_0, n_0 - \alpha) = 0.$$

Поэтому в квантовой механике, использующей только соотношение между наблюдаемыми величинами, не должен возникать вопрос о целом или полуцелом квантовании.

Уравнение (11) и (16) вместе, если их можно решить, позволяют полностью определить не только частоты и энергии, но и квантовотеоретические вероятности переходов. Однако фактически решить эти уравнения удается сначала только в простейших случаях; особые сложности возникают также во многих системах, таких, как атом водорода, из-за того, что решениям соответствуют частично периодические, а частично апериодические движения, вследствие чего ряды (7), (8) и уравнение (16) всегда распадаются на сумму и интеграл. В квантовой механике разделение на «периодические и апериодические движения» в общем случае невозможно.

Тем не менее уравнения (11) и (16) можно было бы по крайней мере принципиально, рассматривать как удовлетворительное решение задач механики, если бы удалось показать, что это решение согласуется или не вступает в противоречие с уже известными квантовомеханическими соотношениями; что, следовательно, в задачах механики малое возмущение влечет за собой добавочные члены в энергии или частотах, которые точно соответствуют найденным Крамерсом и Борном — в противоположность тому, что дала бы классическая теория. Далее было бы необходимо исследовать, соответствует ли в общем случае уравнению (11) в предложенной здесь квантовотеоретической интерпретации интеграл энергии $m\dot{x}^2/2 + U(x) = \text{const}$ и удовлетворяет ли найденная таким образом энергия условию ΔW — аналогичному тому, которое имеет место в классической механике: $\nu = \partial W/\partial J$. Общий ответ на эти вопросы позволил бы вскрыть внутренние взаимосвязи между уже сделанными квантовомеханическими опытами и обеспечил бы возможность построения квантовой механики, последовательно оперирующей только с наблюдаемыми величинами. Не говоря об общей связи дисперсионных формул Крамерса с уравнениями (11) и (16), мы можем ответить на оба поставленных выше вопроса только в совершенно особых частных случаях, когда указанные уравнения допускают решения в форме простых рекуррентных соотношений.

Упомянутая общая связь дисперсионной теории Крамерса с нашими уравнениями (11), (16) состоит в том, что уравнение (11) (т. е. его квантовотеоретический

[4)] Это соотношение было получено на основе рассмотрения дисперсии уже В. Куном (*Kuhn W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 408) и Томасом (*Thomas.* Naturwiss., 1925, 13).

аналог) так же, как и в классической теории, приводит к следствию, что колеблющийся электрон можно считать свободным по отношению к свету, длина волны которого намного короче длин волн всех собственных колебаний системы. Этот результат следует также из теории Крамерса, если принять во внимание еще уравнение (16). Действительно, Крамерс получает для момента, индуцированного волной $E\cos 2\pi\nu t$, следующую формулу

$$M = e^2E\cos 2\pi\nu t\cdot\frac{2}{h}\sum_{\alpha=0}^{\infty}\left\{\frac{|a(n,n+\alpha)|^2\nu(n,n+\alpha)}{\nu^2(n,n+\alpha)-\nu^2}-\frac{|a(n,n-\alpha)|^2\nu(n,n-\alpha)}{\nu^2(n,n-\alpha)-\nu^2}\right\};$$

значит, для $\nu \gg \nu(n,n+\alpha)$

$$M = -\frac{2Ee^2\cos 2\pi\nu t}{\nu^2 h}\sum_{\alpha=0}^{\infty}\left\{|a(n,n+\alpha)|^2\nu(n,n+\alpha)-|a(n,n-\alpha)|^2\nu(n,n-\alpha)\right\},$$

что в силу уравнения (16) преобразуется к виду

$$M = -\frac{e^2E\cos 2\pi\nu t}{\nu^2 4\pi^2 m}.$$

§ 3

Рассмотрим теперь в качестве простейшего примера ангармонический осциллятор

$$\ddot{x}+\omega_0^2x+\lambda x^2=0. \tag{17}$$

В классической механике это уравнение может быть решено подстановкой

$$x=\lambda a_0+a_1\cos\omega t+\lambda a_2\cos 2\omega t+\lambda^2a_3\cos 3\omega t+\ldots+\lambda^{\tau-1}a_\tau\cos\tau\omega t,$$

причем коэффициенты a будут степенными рядами по λ, начинающимися свободным по отношению к λ членом. Попытаемся найти аналогичное решение в квантовой теории, представляя x величинами следующего вида

$$\lambda a(n,n);\quad a(n,n-1)\cos\omega(n,n-1)t;\quad \lambda a(n,n-2)\cos\omega(n,n-2)t;\quad\ldots$$
$$\ldots,\quad \lambda^{\tau-1}a(n,n-\tau)\cos\omega(n,n-\tau)t,\quad\ldots.$$

Рекуррентные формулы для определения коэффициентов a и частот ω в соответствии с уравнениями (3), (4) или (7), (8) гласят (с точностью до членов порядка по λ):
в классической теории

$$\begin{aligned}\omega_0^2a_0(n)+\frac{a_1^2(n)}{2}&=0;\\ -\omega^2+\omega_0^2&=0;\\ (-4\omega^2+\omega_0^2)a_2(n)+\frac{a_1^2}{2}&=0;\\ (-9\omega^2+\omega_0^2)a_3(n)+a_1a_2&=0;\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots&\ldots;\end{aligned} \tag{18}$$

в квантовой теории

$$\begin{aligned}
\omega_0^2 a_0(n) + \frac{a^2(n+1,n) + a^2(n,n-1)}{4} &= 0;\\
-\omega^2(n,n-1) + \omega_0^2 &= 0;\\
\left(-\omega^2(n,n-2) + \omega_0^2\right) a(n,n-2) + \frac{a(n,n-1)a(n-1,n-2)}{2} &= 0;\\
\left(-\omega^2(n,n-3) + \omega_0^2\right) a(n,n-3) + \frac{a(n,n-1)a(n-1,n-3)}{2} &+ \\
+ \frac{a(n,n-2)a(n-2,n-3)}{2} &= 0;\\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned} \tag{19}$$

К этому добавляется квантовое условие:
в классической теории $(J = nh)$

$$1 = 2\pi m \frac{d}{dy} \sum_{-\infty}^{+\infty} \tau^2 \frac{|\alpha_\tau|^2 \omega}{4};$$

в квантовой теории

$$h = \pi m \sum_{0}^{\infty} \left[|a(n+\tau,n)|^2 \omega(n+\tau,n) - |a(n,n-\tau)|^2 \omega(n,n-\tau) \right].$$

Это дает в первом приближении как в классической, так и в квантовой теории

$$a_1^2(n) \quad \text{или} \quad a^2(n,n-1) = \frac{(n + \mathrm{const})h}{\pi m \omega_0}. \tag{20}$$

Постоянную в формуле (20) в квантовой теории можно определить из условия, что величина $a(n_0, n_0 - 1)$ в нормальном состоянии должна обращаться в нуль. Если мы определим n таким образом, что в нормальном состоянии значение n равно нулю, т. е. $n_0 = 0$, то получим

$$a^2(n,n-1) = \frac{nh}{\pi m \omega_0}.$$

Тогда из рекуррентных уравнений (18) следует, что в классической теории величины a_τ (в первом приближении по λ) будут иметь вид $\varkappa(\tau)^{-\tau/2}$, где $\varkappa(\tau)$ означает множитель, не зависящий от n. В квантовой теории из уравнения (19) получается

$$a(n,n-\tau) = \varkappa(\tau)\sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}, \tag{21}$$

причем $\varkappa(\tau)$ означает тот же самый коэффициент пропорциональности, не зависящий от n. При больших значениях n квантовотеоретическое значение a_τ, естественно, приближается асимптотически к классическому.

Для энергии естественно принять классическое выражение

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} + \frac{m\lambda x^3}{3} = W,$$

которое в используемом здесь приближении действительно принимает постоянное значение также и в квантовой теории, в соответствии с уравнениями (19), (20) и (21) равное (с точностью до величин порядка λ^2)

в классической теории

$$W = \frac{nh\omega_0}{2\pi}, \tag{22}$$

в квантовой теории (в соответствии с уравнениями (7), (8))

$$W = \frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)h\omega_0}{2\pi}. \tag{23}$$

Таким образом, в соответствии с этой точкой зрения уже в случае гармонического осциллятора энергия определяется не «классической механикой», т. е. не по формуле (22), а имеет вид (23).

Более точные вычисления с учетом также высших приближений для величин W, a, ω будут проведены на упрощенном примере ангармонического осциллятора следующего типа

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0.$$

В соответствии с классической механикой здесь можно полагать

$$x = a_1 \cos\omega t + \lambda a_3 \cos 3\omega t + \lambda^2 a_5 \cos 5\omega t + \ldots;$$

аналогично, в квантовой теории мы положим

$$a(n, n-1)\cos\omega(n, n-1)t; \quad \lambda a(n, n-3)\cos\omega(n, n-3)t; \quad \ldots .$$

Величина a здесь будет опять иметь вид степенных рядов относительно λ, первый член которых, как в формуле (21), имеет вид

$$a(n, n-\tau) = \varkappa(\tau)\sqrt{\frac{n!}{(n-\tau)!}}.$$

Этот результат получается из уравнений, соответствующих уравнениям (18), (19).

Выполняя вычисление величин ω, a с помощью уравнений (18), (19) в приближении до λ^2 или λ, мы получаем

$$\omega(n, n-1) = \omega_0 + \lambda\frac{3nh}{8\pi\omega_0^2 m} - \lambda^2\frac{3h^2}{256\omega_0^5 m^2\pi^2}(17n^2+7) + \ldots, \tag{24}$$

$$a(n, n-1) = \sqrt{\frac{nh}{\pi\omega_0 m}}\left(1 - \lambda\frac{3nh}{16\pi\omega_0^3 m} + \ldots\right), \tag{25}$$

$$a(n, n-3) = \frac{1}{32}\sqrt{\frac{h^3}{\pi^3\omega_0^7 m^3}n(n-1)(n-2)}\left(1 - \lambda\frac{39(n-1)h}{32\pi\omega_0^3 m}\right). \tag{26}$$

Для энергии, которая определяется как постоянное значение величины (я не смог доказать в общем виде, что все периодические члены действительно равны нулю, но в принятом здесь приближении это оказалось так)

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} + \frac{m\lambda x^4}{4},$$

получается формула

$$W = \frac{\left(n+\frac{1}{2}\right)h\omega_0}{2\pi} + \lambda\frac{3\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)h^2}{8\cdot 4\pi^2\omega_0^2 m} - \lambda^2\frac{h^3}{512\pi^3\omega_0^5 m^2}\left(17n^3+\frac{51}{2}n^2+\frac{59}{2}n+\frac{21}{2}\right). \tag{27}$$

Эту энергию можно вычислить также и по методу Крамерса—Борна, рассматривая член $(m\lambda/4)x^4$ как энергию возмущения гармонического осциллятора. Тогда мы все равно получаем точно результат (27), что представляется мне серьезным доводом в поддержку квантовомеханических уравнений, принятых здесь за основу. Далее, вычисленная по формуле (27) энергия удовлетворяет соотношению (см. (24))

$$\frac{\omega(n, n-1)}{2\pi} = \frac{1}{n}[W(n) - W(n-1)],$$

которое также следует рассматривать как необходимое условие, дающее возможность определить вероятности перехода в соответствии с уравнениями (11) и (16).

В заключение мы рассмотрим в качестве примера ротатор и обсудим связь уравнений (7), (8) с формулами интенсивности для эффекта Зеемана[5] и для мультиплетов[6].

Пусть ротатором будет электрон, обращающийся вокруг ядра на постоянном расстоянии a. Тогда «уравнения движения» как в классической, так и в квантовой теории показывают, что электрон совершает плоское равномерное вращение вокруг ядра на постоянном расстоянии с угловой скоростью ω. «Условие квантования» в форме (12) дает результат

$$h = \frac{d}{dn}(2\pi m a^2\omega),$$

в форме (16) — результат

$$h = 2\pi m[a^2\omega(n+1, n) - a^2\omega(n, n-1)],$$

и в обоих случаях получается

$$\omega(n, n-1) = \frac{h(n+\text{const})}{2\pi m a^2}.$$

Условие, что в нормальном состоянии ($n_0 = 0$) излучение отсутствует, приводит к формуле

$$\omega(n, n-1) = \frac{hn}{2\pi m a^2}. \tag{28}$$

Энергия принимает вид

$$W = \frac{m}{2}v^2,$$

или в соответствии с уравнениями (7), (8)

$$W = \frac{m}{2}a^2\frac{\omega^2(n, n-1) + \omega^2(n+1, n)}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right), \tag{29}$$

[5] *Goudsmith, Kronig R. L.* Naturwiss., 1925, **13**, 90; *Hönl H.* Zs. Phys., 1925, **31**, 340.

[6] *Kronig R. L.* Zs. Phys., 1925, **31**, 885; *Sommerfeld A., Hönl H.* Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., 1925, **141**; *Russell H. N.* Nature, 1925, **115**, 835

что опять удовлетворяет соотношению $\omega(n, n-1) = \frac{2\pi}{h}[W(n)-W(n-1)]$. В поддержку отличающихся от принятых сегодня в теории формул (28) и (29), по-видимому, говорит тот факт, что многие полосатые спектры (в том числе и такие, для которых существование электронного импульса представляется невероятным), по Кратцеру[7], приводят к формулам типа (28), (29) (которые прежде пытались объяснить, вводя в угоду классической механике полуцелое квантование).

Для того, чтобы получить в случае ротатора формулы Гоудсмита—Кронига—Хенля, мы выйдем за рамки задач с одной степенью свободы и предположим, что ротатор совершает очень медленную процессию ν вокруг оси z внешнего поля, ориентированной в некотором направлении пространства. Предположим, что этой прецессии соответствует квантовое число m. Тогда движение характеризуется величинами

$$\begin{aligned} z&: \quad a(n, n-1; m, m)\cos\omega(n, n-1)t; \\ x+iy&: \quad b(n, n-1; m, m-1)e^{i[\omega(n,n-1)+o]t}; \\ &\quad\;\; b(n, n-1; m-1, m)e^{i[-\omega(n,n-1)+o]t}. \end{aligned}$$

Уравнения движения принимают простую форму

$$x^2 + y^2 + z^2 = a^2.$$

В соответствии с уравнением (7) отсюда получается[8]

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}a^2(n, n-1; m, m) + b^2(n, n-1; m, m-1) + b^2(n, n-1; m, m+1) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}a^2(n+1, n; m, m)b^2(n+1n; m-1, m) + b^2(n+1, n; m+1, m)\right] = a^2; \end{aligned} \qquad (30)$$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}a(n, n-1; m, m)a(n-1, n-2; m, m) = \\ &\qquad = b(n, n-1; m, m+1)b(n-1, n-2; m+1, m) + \\ &\qquad\quad + b(n, n-1; m, m-1)b(n-1, n-2; m-1, m). \end{aligned} \qquad (31)$$

К этим уравнениям добавляется условие квантования, следующие из (16):

$$\begin{aligned} &2\pi m\left[b^2(n, n-1; m, m-1)\omega(n, n-1) - b^2(n, n-1; m-1, m)\omega(n, n-1)\right] = \\ &\qquad = (m + \mathrm{const})h. \end{aligned} \qquad (32)$$

Все эти уравнения удовлетворяют (с точностью до неопределенной постоянной при m) соответствующим классическим соотношениям, однозначно определяющим a_0, b_1, b_{-1}:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}a_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 = a^2; \\ &\frac{1}{4}a_0^2 = b_1 b_{-1}; \\ &2\pi m(b_{+1}^2 - b_{-1}^2)\omega = (m + \mathrm{const})h. \end{aligned} \qquad (33)$$

---

[7] См., например, *Kratzer B.A.* Sitzungsber. Bayr. Akad., 1922, 107.

[8] Уравнение (30) в основном совпадает с правилами сумм Орнштейна—Бургера.

Самое простое решение квантовотеоретических уравнений (30), (31), (32) имеет вид

$$b(n, n-1; m, m-1) = a\sqrt{\frac{(n+m+1)(n+m)}{4\left(n+\frac{1}{2}\right)n}};$$

$$b(n, n-1; m-1, m) = a\sqrt{\frac{(n-m)(n-m+1)}{4\left(n+\frac{1}{2}\right)n}};$$

$$a(n, n-1; m, m) = a\sqrt{\frac{(n+m+1)(n-m)}{\left(n+\frac{1}{2}\right)n}}.$$

Эти выражения согласуются с формулами Гоудсмита, Кронига и Хенля; однако далеко не просто доказать, что они будут давать *единственное* решение уравнений (30), (31), (32) — хотя мне это кажется вероятным, если учитывать граничные условия (обращение в нуль величин a, b на «границе», см. цитированные выше работы Кронига, Зоммерфельда и Хенля, Рассела).

Аналогичное проведенному выше рассмотрение формул для интенсивности мультиплетов также приводит к результату, что эти формулы согласуются с уравнениями (7) и (16). Этот результат также может служить доводом в поддержку правильности кинематического уравнения (7).

Можно ли считать удовлетворительными уже в принципиальном отношении аналогичные изложенным выше методы определения квантовотеоретических величин с помощью соотношений между наблюдаемыми величинами, или же эти методы представляют лишь еще один слишком грубый подход к крайне запутанной физической проблеме квантовотеоретической механики — это будет ясно только при более основательном математическом исследовании методов, примененных здесь весьма поверхностно.

Геттинген, Институт теоретической физики

(*Поступила 29 июля 1925 г.*)

К КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ*

М. Борн и П. Иордан

Недавно предложенный Гейзенбергом подход развит (сначала для систем с одной степенью свободы) в систематическую теорию квантовой механики. Математическим аппаратом теории служит матричное исчисление. После краткого изложения основных понятий теории матриц дается вывод механических уравнений движения из некоего вариационного принципа и приводится доказательство того, что закон сохранения энергии и условие частот Бора следуют из уравнений механики в силу условий квантования Гейзенберга. Вопрос об однозначности решения и интерпретации фаз в парциальных колебаниях затрагивается на примере гармонического осциллятора. В заключение излагается попытка включить в новую теорию законы электромагнитного поля.

ВВЕДЕНИЕ

Подход к построению новой кинематики и механики, удовлетворяющий основным требованиям квантовой теории, который недавно был опубликован в этом журнале Гейзенбергом[1], представляется нам необычайно важным. Этот подход представляет собой попытку учесть новые факты путем создания новой адекватной системы понятий вместо более или менее искусственной и натянутой подгонки старых привычных понятий. Гейзенберг столь отчетливо сформулировал те физические идеи, которыми он руководствовался, что любые дополнительные пояснения становятся излишними. Однако с формальной, математической точки зрения развитые им соображения, как он сам подчеркнул, находятся лишь в начальной стадии. Свои гипотезы Гейзенберг продемонстрировал на простых примерах и не довел до общей теории. Поощряемые тем, что с идеями Гейзенберга нам довелось знакомиться in statu nascendi, мы взяли на себя смелость завершить его исследования, придав формально-математический вид его подходу, и предлагаем сейчас некоторые из полученных нами результатов. Они свидетельствуют, что на заложенном Гейзенбергом основании действительно можно возвести здание математической теории квантовой теории, обладающей замечательно глубокой аналогией с классической механикой, и в то же время правильно передающей специфические особенности квантовых явлений.

Следуя Гейзенбергу, мы ограничимся сначала рассмотрением системы *с одной степенью свободы*, относительно которой мы предположим, что она, говоря классическим языком, *периодична*. Обобщением нашей математической теории на случай систем со сколь угодно большим числом степеней свободы, а также на апериодические движения, мы займемся в дальнейшем. Что же касается более существенного обобщения предложенного Гейзенбергом подхода, то мы не будем ограничиваться ни рассмотрением нерелятивистской квантовой механики, ни вычислениями,

* Zur Quantenmechanik. (Von *M. Born* und *P. Jordan*). — Zs. Phys., 1925, **34**, H. I–II, 858–888. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 879.

производимыми только в декартовых координатах. Единственное ограничение, налагаемое нами на координаты, заключается в том, что использовать так называемые *координаты либрации*, которые в классической теории являются *периодическими* функциями времени. Впрочем, в некоторых случаях естественно ввести другие координаты. Например, в случае ротатора угол поворота φ-линейная функция времени. Аналогичным образом поступил, рассматривая ротатор, Гейзенберг, однако осталось невыясненным, можно ли обосновать использованный им метод с точки зрения последовательной квантовой механики.

Математическую основу предложенного Гейзенбергом подхода составляет *закон умножения* квантовомеханических величин, который Гейзенберг вывел при помощи остроумных соображений соответствия. Приводимая ниже наша формулировка формализма Гейзенберга основана на следующем замечании: правило умножения квантовомеханических величин представляет собой не что иное, как хорошо известный математикам закон *умножения матриц*. Бесконечная по двум направлениям таблица (с индексами, принимающими дискретные или непрерывные значения) — так называемая матрица — служит представлением физической величины, задаваемой в классической теории как функция времени. Таким образом, математические методы новой квантовой механики характеризуются тем, что вместо обычного анализа, оперирующего с числами, в них используется *матричное исчисление.*

Эти методы мы попытались применить к анализу простейших проблем механики и электродинамики. Выведенный из соображений соответствия *вариационный принцип* приводит к *уравнениям движения* для функции Гамильтона наиболее общего вида по аналогии с классическими каноническими уравнениями. Условия квантования вместе с соотношениями, вытекающими из уравнений движения, допускают простое матричное представление. Матрицы позволяют дать строгое доказательство *закона сохранения энергии и условия частот Бора*, выполняющихся в указанном Гейзенбергом смысле. Самому Гейзенбергу не удалось полностью доказать свои утверждения даже для рассмотренных им простых примеров. Затем мы переходим к более подробному рассмотрению этих примеров, чтобы понять роль, которую играют в новой теории фазы парциальных колебаний. В заключение мы показываем, что основные законы электромагнитного поля в вакууме также укладываются в рамки новых методов, и проводим обоснование высказанного Гейзенбергом предположения о том, что абсолютные величины элементов матрицы, представляющей электрический момент атома, служат мерой вероятностей перехода.

Глава 1

МАТРИЧНОЕ ИСЧИСЛЕНИЕ

§1

Элементарные операции. Функции

Мы будем рассматривать квадратные бесконечные матрицы[2] и обозначать их полужирными буквами, в то время как светлые буквы будут всегда обозначать обычные числа:

$$\mathbf{a} = \big(a(n,m)\big) = \begin{pmatrix} a(0,0) & a(0,1) & a(0,2) & \dots \\ a(1,0) & a(1,1) & a(1,2) & \dots \\ a(2,0) & a(2,1) & a(2,2) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

[2] Более подробное изложение теории матриц см., например, в книгах *Bôcher M.* Einführung in die höhere Algebra. Leipzig: Teubner, 1910. §22–25, а также *Courant R., Hilbert D.* Methoden der mathematischen Physik, I. Berlin: Springer Verlag, 1924. Kap. I.

Равенство двух матриц означает равенство соответствующих элементов:

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} \quad \text{означает} \quad a(n, m) = b(n, m). \tag{1}$$

Сложение определяется как сложение соответствующих элементов.

$$\mathbf{a} = \mathbf{b} + \mathbf{c} \quad \text{означает} \quad a(n, m) = b(n, m) + c(n, m). \tag{2}$$

Умножение определяется известным из теории определителей правилом «строка на столбец»:

$$\mathbf{a} = \mathbf{bc} \quad \text{означает} \quad a(n, m) = \sum_{k=0}^{\infty} b(n, k)c(k, m). \tag{3}$$

Возведение в степень определяется как повторное умножение. Для умножения выполняется ассоциативный закон, а сложение и умножение связаны дистрибутивным законом:

$$(\mathbf{ab})\mathbf{c} = \mathbf{a}(\mathbf{bc}), \tag{4}$$

$$\mathbf{a}(\mathbf{b} + \mathbf{c}) = \mathbf{ab} + \mathbf{ac}. \tag{5}$$

Коммутативный закон для умножения, вообще говоря, *не выполняется*: равенство $\mathbf{ab} = \mathbf{ba}$ справедливо *не во всех случаях*. Если это равенство выполняется, то говорят, что матрицы $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$ *коммутируют*. Единичная матрица, задаваемая соотношениями

$$\mathbf{1} = (\delta_{nm}); \quad \begin{cases} \delta_{nm} = 0 & \text{при} \quad n \neq m, \\ \delta_{nm} = 1 & \text{при} \quad n = m \end{cases} \tag{6}$$

обладает свойством

$$\mathbf{a1} = \mathbf{1a} = \mathbf{a}. \tag{6a}$$

Матрица $\mathbf{a}^{-1}$, обратная[3] матрице $\mathbf{a}$, определяется соотношениями

$$\mathbf{a}^{-1}\mathbf{a} = \mathbf{aa}^{-1} = \mathbf{1}. \tag{7}$$

«Средним» матрицы $\mathbf{a}$ называется матрица, диагональные элементы которой совпадают с соответствующими диагональными элементами матрицы $\mathbf{a}$, а все остальные элементы равны нулю:

$$\bar{\mathbf{a}} = \big(\delta_{nm} a(n, n)\big). \tag{8}$$

Сумма диагональных элементов называется *следом* матрицы $\mathbf{a}$ и обозначается $D(\mathbf{a})$:

$$D(\mathbf{a}) = \sum_n a(n, n). \tag{9}$$

Пользуясь правилом (5) умножения матриц, нетрудно доказать следующее утверждение: если след произведения $\mathbf{y} = \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 \ldots \mathbf{x}_m$ конечен, то он не изменяется при циклической перестановке сомножителей:

$$D(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2 \ldots \mathbf{x}_m) = D(\mathbf{x}_r\mathbf{x}_{r+1} \ldots \mathbf{x}_m\mathbf{x}_1 \ldots \mathbf{x}_{r-1}). \tag{10}$$

[3] Как известно, в случае *конечных* квадратных матриц приведенное нами определение позволяет однозначно задать матрицу $\mathbf{a}^{-1}$, если определитель A матрицы $\mathbf{a}$ отличен от нуля. Если $A = 0$, то матрица, обратная матрице $\mathbf{a}$, не существует.

В правильности этого утверждения, очевидно, достаточно убедиться в случае *двух* сомножителей.

Если элементы матриц $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ — функции параметра t, то

$$\frac{d}{dt}\sum_k a(n,k)b(k,m) = \sum_k \{\dot{a}(n,k)b(k,m) + a(n,k)\dot{b}(k,m)\},$$

или (по определению (3))

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{ab}) = \dot{\mathbf{a}}\mathbf{b} + \mathbf{a}\dot{\mathbf{b}}. \tag{11}$$

Повторное применение соотношения (11) приводит к его обобщению

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_n) = \dot{\mathbf{x}}_1\mathbf{x}_2\ldots\mathbf{x}_n + \mathbf{x}_1\dot{\mathbf{x}}_2\ldots\mathbf{x}_n + \ldots + \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\ldots\dot{\mathbf{x}}_n. \tag{11'}$$

Операции (2) и (5) позволяют определить *функции* от матриц. В качестве функции $\mathbf{f}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n)$ наиболее общего вида мы рассмотрим сначала функцию, формально представимую в виде суммы конечного или бесконечно большого числа произведений степеней аргументов $\mathbf{x}_k$ с числовыми коэффициентами. Функции $\mathbf{y}_l(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n)$ могут быть заданы также уравнениями.

$$\begin{gathered}\mathbf{f}_1(\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n; \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_n) = 0,\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\ \mathbf{f}_n(\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n, \mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n) = 0.\end{gathered} \tag{12}$$

Чтобы получить функции $\mathbf{y}_l$ описанного выше вида, удовлетворяющие уравнениям (12), необходимо лишь разложить $\mathbf{y}_l$ в ряды по произведениям степеней матриц $\mathbf{x}_k$ и, подставив в уравнения (12), делить коэффициенты. Ясно, что уравнений всегда получается столько же, сколько неизвестных. К сожалению, в рассматриваемом случае число уравнений и неизвестных больше, чем при использовании метода неопределенных коэффициентов в обычном анализе с *коммутативным* умножением. В каждом из уравнений (12), подставив разложения для $\mathbf{y}_l$ и собрав подобные члены, мы помимо слагаемого $C'\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2$ получим еще одно слагаемое $C''\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1$, и обращать в нуль нам придется как C', так и C'' (а не только $C' + C''$). Однако для этого в разложении каждой функции $\mathbf{y}_l$ имеются два члена $\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1$ с двумя коэффициентами, которыми мы и можем воспользоваться.

§ 2
Символическое дифференцирование

В этом параграфе мы хотим рассмотреть вычислительный процесс, который неоднократно понадобится нам в дальнейшем. Мы будем называть его *дифференцированием* матричной функции. Однако следует иметь в виду, что эта операция обладает свойствами, лишь частично напоминающими свойства операции дифференцирования в обычном анализе. Например, правило дифференцирования произведения или сложной функции в матричном исчислении в общем случае не выполняется. Лишь в том случае, если матрицы *коммутируют* между собой при дифференцировании их остаются в силе все правила обычного анализа.

Пусть

$$\mathbf{y} = \prod_{m=1}^{s} \mathbf{x}_{l_m} = \mathbf{x}_{l_1}\mathbf{x}_{l_2}\ldots\mathbf{x}_{l_s}. \tag{13}$$

Положим по определению

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}_k} = \sum_{r=1}^{s} \delta_{l_r k} \prod_{m=r+1}^{s} \mathbf{x}_{l_m} \prod_{m=1}^{m=r-1} \mathbf{x}_{l_m}, \quad \begin{cases} \delta_{jk} = 0 & \text{при } j \neq k, \\ \delta_{kk} = 1. \end{cases} \tag{14}$$

Словесно это правило формулируется следующим образом. Пусть в заданном произведении все сомножители выписаны *отдельно* (например, произведение $\mathbf{x}_1^3\mathbf{x}_2^2$ представлено в виде $\mathbf{x}_1\mathbf{x}_1\mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\mathbf{x}_2$. Выделим какой-нибудь сомножитель $\mathbf{x}_k$ и умножим произведение всех следующих за $\mathbf{x}_k$ сомножителей его на произведение всех сомножителей, предшествующих $\mathbf{x}_k$ (именно в этом порядке!). Сумма всех полученных при этом членов и будет производной исходного произведения по $\mathbf{x}_k$.

Поясним правило дифференцирования произведения матриц на нескольких примерах:

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}^n, \qquad \frac{d\mathbf{y}}{d\mathbf{x}} = n\mathbf{x}^{n-1},$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}_1^n\mathbf{x}_2^m, \qquad \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}_1} = \mathbf{x}_1^{n-1}\mathbf{x}_2^m + \mathbf{x}_1^{n-2}\mathbf{x}_2^m\mathbf{x}_1 + \ldots + \mathbf{x}_2^m\mathbf{x}_1^{n-1},$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3, \qquad \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}_1} = \mathbf{x}_1\mathbf{x}_2\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3 + \mathbf{x}_2\mathbf{x}_1\mathbf{x}_3\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_3\mathbf{x}_1^2\mathbf{x}_2.$$

Потребовав дополнительно, чтобы

$$\frac{\partial(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2)}{\partial \mathbf{x}_k} = \frac{\partial \mathbf{y}_1}{\partial \mathbf{x}_k} + \frac{\partial \mathbf{y}_2}{\partial \mathbf{x}_k}, \tag{15}$$

получим тем самым производную $\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}$ для аналитических функций $\mathbf{y}$ самого общего вида.

Имея в виду эти определения, а также определение следа матрицы (9), получаем соотношение

$$\frac{\partial D(\mathbf{y})}{\partial x_k(n,m)} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x_k}(n,m), \tag{16}$$

где справа стоит элемент (n,m) матрицы $\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}_k}$. Это соотношение можно использовать для определения производной $\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}_k}$.

Чтобы доказать его, достаточно рассмотреть функцию $\mathbf{y}$ вида (13).

Из (14) и (5) получаем:

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}_k}(m,n) = \sum_{r=1}^{s} \delta_{l_r k} \sum_{\tau} \prod_{p=r+1}^{s} x_{l_p}(\tau_p, \tau_{p+1}) \prod_{p=1}^{r-1} x_{k_p}(\tau_p, \tau_{p+1}). \tag{17}$$

$$\tau_{r+1} = m, \quad \tau_{s+1} = \tau_1, \quad \tau_r = n.$$

С другой стороны, из (3) и (9) следует, что

$$\frac{\partial D(\mathbf{y})}{\partial x_k(m,n)} = \sum_{r=1}^{s} \delta_{l_r k} \sum_{\tau} \prod_{p=1}^{r-1} x_{l_p}(\tau_p, \tau_{p+1}) \prod_{p=r+1}^{s} x_{l_p}(\tau_p, \tau_{p+1}), \tag{17'}$$

$$\tau_1 = \tau_s + 1, \quad \tau_r = n, \quad \tau_{r+1} = m.$$

Сравнивая (17) и (17′), приходим к соотношению (16).

Подчеркнем важное для последующего следствие из определения (14): *частные производные произведения матриц инвариантны относительно циклических перестановок сомножителей.* В силу соотношения (16) это утверждение также должно следовать из (10).

В заключение наших предварительных замечаний несколько слов необходимо сказать о функциях $\mathbf{g}(\mathbf{p},\mathbf{q})$ *двух* переменных. Для

$$\mathbf{y} = \mathbf{p}^s\mathbf{q}^r \tag{18}$$

получаем из (14):

$$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{p}} = \sum_{l=1}^{s-1} \mathbf{p}^{s-1-l}\mathbf{q}^r\mathbf{p}^l, \quad \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{q}} = \sum_{j=1}^{r-1} \mathbf{q}^{r-1-j}\mathbf{p}^s\mathbf{q}^j. \tag{18'}$$

Как упоминалось в главе 1, § 1, рассматриваемая функция $\mathbf{g}(\mathbf{p},\mathbf{q})$ наиболее общего вида представима в виде линейной комбинации членов

$$\mathbf{z} = \prod_{j=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}). \tag{19}$$

Если ввести сокращенное обозначение

$$\mathbf{P}_l = \prod_{j=l+1}^{k} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}) \prod_{j=1}^{l-1} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}), \tag{20}$$

то производные от z можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{p}} &= \sum_{l=1}^{k}\sum_{m=0}^{s_l-1} p^{s_l-1-m} q^{r_l}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^m, \\ \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{q}} &= \sum_{l=1}^{k}\sum_{m=0}^{r_l-1} q^{r_l-1-m}\mathbf{P}_l p^{s_l}\mathbf{q}^m. \end{aligned} \tag{21}$$

Из этих уравнений вытекает одно важное следствие. Рассмотрим матрицы

$$\mathbf{d}_1 = \mathbf{q}\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{q}, \quad \mathbf{d}_2 = \mathbf{p}\frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{p}}\mathbf{p}. \tag{22}$$

Подставляя в (22) выражения для производных (21), получаем:

$$\mathbf{d}_1 = \sum_{l=1}^{k} (\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l} - \mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}),$$

$$\mathbf{d}_2 = \sum_{l=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l - \mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}),$$

откуда

$$\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 = \sum_{l=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}\mathbf{P}_l - \mathbf{P}_l\mathbf{p}^{s_l}\mathbf{q}^{r_l}).$$

В правой части этого выражения второй член каждого слагаемого старше первого члена следующего слагаемого, а первый и последний член всей суммы взаимно уничтожаются, и мы получаем

$$\mathbf{d}_1 + \mathbf{d}_2 = 0. \tag{23}$$

В силу линейности этого выражения по z оно выполняется не только для $\mathbf{z}$ вида (19), но и для произвольных аналитических функций $\mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$[4].

В заключение нашего беглого обзора матричного исчисления мы хотим доказать следующую теорему: любое матричное уравнение

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \ldots, \mathbf{x}_r) = 0$$

остается в силе, если во всех матрицах — аргументах $\mathbf{x}_j$ *произвести одну и ту же перестановку всех строк и столбцов.* Достаточно доказать, что для двух матриц $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$, переходящих при такой операции в матрицы $\mathbf{a}'$, $\mathbf{b}'$, выполняются тождества

$$\mathbf{a}' + \mathbf{b}' = (\mathbf{a} + \mathbf{b})', \quad \mathbf{a}'\mathbf{b}' = (\mathbf{ab})',$$

где матрицы в правых частях получаются из матриц $\mathbf{a} + \mathbf{b}$ и $\mathbf{ab}$ при одной и той же перестановке строк и столбцов.

Наше утверждение мы докажем, заменив операцию перестановки умножением на некоторую специальным образом выбранную матрицу[5].

Условимся записывать перестановку в виде

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 & \ldots \\ k_0 & k_1 & k_2 & k_3 & \ldots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n \\ k_n \end{pmatrix}.$$

Поставим ей в соответствие *матрицу перестановки*

$$\mathbf{p} = \big(p(n, m)\big), \quad p(n, m) = \begin{cases} 1 & \text{при } m = k_n, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Транспонированную матрицу обозначим

$$\widetilde{\mathbf{p}}(\widetilde{p}(n, m)), \quad \widetilde{p}(n, m) = \begin{cases} 1 & \text{при } n = k_m, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Умножив матрицу $\mathbf{p}$ на транспонированную матрицу $\widetilde{\mathbf{p}}$ получим:

$$\mathbf{p}\widetilde{\mathbf{p}} = \Big(\sum_k p(n, k)\widetilde{p}(k, m)\Big) = (\delta_{nm}) = \mathbf{1},$$

так как сомножители $\mathbf{p}(n, k)$ и $\widetilde{\mathbf{p}}(k, m)$ обращаются в нуль одновременно лишь в том случае, если $k = k_n = k_m$, то есть если $n = m$. Следовательно, матрица $\widetilde{\mathbf{p}}$ совпадает с матрицей, обратной матрице p:

$$\widetilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}^{-1}.$$

[4] В действительности для функций r переменных выполняется более общее соотношение

$$\sum_r \left(\mathbf{x}_r \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_r} - \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}_r}\mathbf{x}_r\right) = 0.$$

[5] Избранный нами способ доказательства обладает тем преимуществом, что отчетливо показывает тесную связь перестановок с важным классом более общих преобразований матриц. В справедливости доказываемой нами теоремы можно убедиться и непосредственно, если заметить, что определения *равенства*, а также *сложения* и *умножения* матриц никак не связаны с упорядочением строк и столбцов матриц.

Пусть **a** — произвольная матрица. Тогда

$$\mathbf{pa} = \left(\sum_k p(n,k)a(k,m)\right) = \left(a(k_n, m)\right)$$

— матрица, возникающая из матрицы **a** при перестановке $\begin{pmatrix} n \\ k_n \end{pmatrix}$ строк, а

$$\mathbf{ap}^{-1} = \left(\sum_k a(n,k)\,\widetilde{p}(k,m)\right) = \left(a(n, k_m)\right)$$

— матрица, возникающая из **a** при перестановке столбцов. Подействовав на строки и столбцы матрицы **a** одной и той же перестановкой, получим матрицу

$$\mathbf{a}' = \mathbf{pap}^{-1},$$

откуда непосредственно следует:

$$\mathbf{a}' + \mathbf{b}' = \mathbf{p}(\mathbf{a}+\mathbf{b})\mathbf{p}^{-1} = (\mathbf{a}+\mathbf{b})',$$
$$\mathbf{a}'\mathbf{b}' = \mathbf{pabp}^{-1} = (\mathbf{ab})'.$$

Тем самым наше утверждение доказано.

Итак, мы видим, что ни порядок элементов, ни их расположение по рангу не определяется матричными уравнениями.

Справедливо гораздо более общее утверждение: любое матричное равенство инвариантно относительно преобразования вида

$$\mathbf{a}' = \mathbf{bab}^{-1},$$

где **b** — *произвольная* матрица. Правда, как мы увидим в дальнейшем, на матричные дифференциальные уравнения это утверждение переносится не автоматически.

Глава 2

ДИНАМИКА

§1

Основные законы

Динамическая система описывается *координатой* **q** и *импульсом* **p**, задаваемых в виде матриц

$$\mathbf{q} = \left(q(n,m)e^{2\pi i\nu(n,m)t}\right), \quad \mathbf{p} = \left(p(n,m)e^{2\pi i\nu(n,m)t}\right). \tag{24}$$

Величины $\nu(n,m)$ означают здесь квантовотеоретические частоты, соответствующие переходам между состояниями с *квантовыми числами* n и m. Матрицы (24) должны быть *эрмитовыми*, то есть при транспонировании каждый элемент матрицы должен переходить в комплексно-сопряженную величину (при всех вещественных t). Следовательно, должны выполняться соотношения

$$q(n,m)q(m,n) = |q(n,m)|^2 \tag{25}$$

и

$$\nu(n,m) = -\nu(m,n). \tag{26}$$

Если $\mathbf{q}$ — *декартовы* координаты, то величины (25) задают меру *вероятностей* переходов $n \leftrightarrow m$ (см. главу 4, § 2).

Потребуем, чтобы выполнялось соотношение

$$\nu(j,k) + \nu(k,l) + \nu(l,j) = 0. \tag{27}$$

Вместе с соотношением (26) оно означает, что существуют величины W_n, для которых

$$h\nu(n,m) = W_n - W_m. \tag{28}$$

Если учесть (2) и (3), то отсюда следует, что функция $g(p,q)$ всегда имеет вид

$$\mathbf{g} = \left(g(n,m)e^{2\pi i\nu(n,m)t}\right), \tag{29}$$

где матрица $\left(g(n,m)\right)$ получается из матриц $\left(q(n,m)\right)$, $\left(p(n,m)\right)$ так же, как матрица $\mathbf{g}$ из матриц $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$. Поэтому вместо не используемого впредь представления (24) можно выбрать более краткие обозначения

$$\mathbf{q} = \left(q(n,m)\right), \quad \mathbf{p} = \left(p(n,m)\right). \tag{30}$$

Производную матрицы $\mathbf{g} = \left(g(n,m)\right)$ по времени мы получим, обратившись еще раз к представлению (24) (или (29)):

$$\dot{\mathbf{g}} = 2\pi i\left(\nu(n,m)g(n,m)\right). \tag{31}$$

Если, как мы предполагаем, $\nu(n,m) \neq 0$ при $n \neq m$, то $\dot{\mathbf{g}} = 0$ означает, что $\mathbf{g}$ — диагональная матрица с $g(n,m) = \delta_{nm}g(n,n)$.

Дифференциальное уравнение $\dot{\mathbf{g}} = \mathbf{a}$ остается инвариантным, если строки и столбцы всех матриц, а также числа W_n подвергнуть одной и той же перестановке. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим диагональную матрицу

$$\mathbf{W} = \left(\delta_{nm}W_n\right).$$

Для нее имеем:

$$\mathbf{Wg} = \left(\sum_k \delta_{nk}W_n g(k,m)\right) = \left(W_n g(n,m)\right),$$

$$\mathbf{gW} = \left(\sum_k g(n,n)\delta_{km}W_k\right) = \left(W_m g(n,m)\right)$$

и по определению производной матрицы (31)

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{2\pi i}{h}\left((W_n - W_m)g(n,m)\right) = \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Wg} - \mathbf{gW}).$$

Если $\mathbf{p}$ — матрица перестановки, то трансформированная матрица

$$\mathbf{W}' = \mathbf{pWp}^{-1} = \left(\delta_{n_k m}W_{n_k}\right)$$

диагональна, причем на ее диагонали стоят величины W_n, подвергнутые перестановке. Следовательно,

$$\mathbf{p}\dot{\mathbf{g}}\mathbf{p}^{-1} = \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{W}'\mathbf{g}' - \mathbf{g}'\mathbf{W}') = \dot{\mathbf{g}}',$$

где $\mathbf{g}' = \mathbf{p}\mathbf{g}\mathbf{p}^{-1}$, а $\dot{\mathbf{g}}'$ означает производную матрицы $\mathbf{g}'$ по времени, образованную по правилу (31) — с переставленными $\mathbf{W}_n$.

Таким образом, строки и столбцы матрицы $\dot{\mathbf{g}}$ претерпевают ту же перестановку, что и строки и столбцы матрицы $\mathbf{g}$, из чего и следует наше утверждение.

Следует подчеркнуть, что аналогичное утверждение для произвольного преобразования вида $\mathbf{a}' = \mathbf{b}\mathbf{a}\mathbf{b}^{-1}$ не верно, поскольку матрица $\mathbf{W}'$ не диагональна. Тем не менее мы считаем необходимым изучить общие преобразования несколько подробнее, чтобы понять более глубокие взаимосвязи новой теории. К этим вопросам мы намерены вернуться в дальнейшем[6].

Для функции Гамильтона вида

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + \mathbf{U}(\mathbf{q})$$

мы вместе с Гейзенбергом предполагаем, что уравнения движения имеют такой же вид, как и в классике, в силу чего их можно записать в обозначениях главы 1, § 2

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{1}{m}\mathbf{p}, \\ \dot{\mathbf{p}} &= -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{q}}. \end{aligned} \tag{32}$$

Пользуясь принципом соответствия следует попытаться вывести уравнения движения для произвольной функции Гамильтона $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Они необходимы для релятивистской механики и в особенности для рассмотрения движения электронов в магнитном поле. В последнем случае функция Гамильтона $\mathbf{H}$ не представима в виде суммы двух функций, одна из которых зависит только от импульсов, а другая — только от координат.

В классике уравнения движения выводятся из принципа действия

$$\int_{t_0}^{t_1} L\,dt = \int_{t_0}^{t_1} \{p\dot{q} - H(p, q)\}\,dt = \text{экстремум}. \tag{33}$$

Если предположить, что в (33) вместо L подставлено разложение Фурье, а промежуток времени $t_1 - t_0$ достаточно велик, то вклад в интеграл даст лишь постоянный член функции Лагранжа L. Вид, который принимает при этом принцип действия, наводит на мысль о следующем его квантовомеханическом аналоге.

Должен достигаться экстремум суммы диагональных элементов $D(\mathbf{L}) = \sum_k L(k, k)$:

$$D(\mathbf{L}) = D(\mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})) = \text{экстремум} \tag{34}$$

при надлежаще выбранных $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ и *фиксированных* $\nu(n, m)$.

Приравнивая нулю производные от $D(\mathbf{L})$ по элементам матриц $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, получаем уравнения движения

$$\begin{aligned} 2\pi i\nu(n, m)q(n, m) &= \frac{\partial D(\mathbf{H})}{\partial p(m, n)}, \\ 2\pi i\nu(m, n)p(m, n) &= \frac{\partial D(\mathbf{H})}{\partial q(m, n)}. \end{aligned}$$

[6] См. выходящее в ближайшем будущем продолжение этой работы.

Из соотношений (26), (31) и (16) следует, что уравнения движения в общем случае приводятся к каноническому виду

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathbf{p}}, \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathbf{q}}. \tag{35}$$

В качестве условия квантования Гейзенберг воспользовался соотношением, установленным Томасом[7] и Куном[8]. Равенство

$$J = \oint p\,dq = \int_0^{1/\nu} p\dot{q}\,dt$$

«классической» квантовой теории, разлагая p и q в ряд Фурье

$$p = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} p_\tau e^{2\pi i \nu \tau t}, \quad q = \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} q_\tau e^{2\pi i \nu \tau t}$$

можно преобразовать к виду

$$1 = 2\pi i \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial}{\partial J}(q_\tau p_{-\tau}). \tag{36}$$

Если при этом $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$, то p_τ можно выразить через q_τ и получить классическое уравнение, которое при преобразовании по принципу соответствия переходит в разностное уравнение, совпадающее с соотношением Томаса и Куна. Но поскольку мы не предполагаем, что выполняется соотношение $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$, то уравнение (36) требуется перевести в разностное уравнение, минуя «классический» этап.

Соответствовать должны величины

$$\sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau \frac{\partial}{\partial J}(q_\tau p_{-\tau}) \quad \text{и}$$

$$\frac{1}{h} \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \big(q(n+\tau, n)p(n, n+\tau) - q(n, n-\tau)p(n-\tau, n)\big),$$

при этом в правой сумме $q(n, m)$ и $p(n, m)$ с отрицательными индексами следует положить равными нулю. В результате мы получим в качестве аналога соотношения (36) в духе принципа соответствия условие квантования

$$\sum_k \big(p(n,k)q(k,n) - q(n,k)p(k,n)\big) = \frac{h}{2\pi i}. \tag{37}$$

Оно представляет собой бесконечный набор равенств: по одному для каждого n. В частности, при $\mathbf{p} = m\dot{\mathbf{q}}$, мы получаем

$$\sum \nu(k,n)|q(n,k)|^2 = \frac{h}{8\pi^2 m},$$

---

[7] *Thomas W.* Naturwiss., 1925, **13**, 627.

[8] *Kuhn W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 408.

что, как нетрудно видеть, совпадает с условием квантования Гейзенберга, или соотношением Томаса — Куна. Соотношение (57) следует считать существенным обобщением этого равенства.

Из (37) видно, что сумма диагональных элементов $D(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ должна быть бесконечно большой: в противном случае из (10) следовало бы, что $D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - D(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = 0$, в то время как соотношение (37) приводит к $D(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - D(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \infty$. Таким образом, рассматриваемые матрицы никогда не бывают конечными[9].

§ 2
Следствия. Закон сохранения энергии и условие частот

Содержание предыдущего пункта полностью устанавливает основные законы новой механики. Все остальные законы квантовой механики, претендующие на общезначимость, должны быть выведены из основных. Прежде всего необходимо доказать *закон сохранения энергии и условие частот Бора*. Закон сохранения энергии утверждает, что если $\mathbf{H}$ — энергия, то $\dot{\mathbf{H}} = 0$, или $\mathbf{H}$ — *диагональная матрица*. Диагональные элементы $H(n, n)$ матрицы H интерпретируются по Гейзенбергу как *значения энергии различных состояний системы*, а условие частот Бора требует, чтобы

$$h\nu(n, m) = H(n, n) - H(m, m)$$

или

$$W_n = H(n, n) + \text{const}.$$

Рассмотрим величину

$$\mathbf{d} = \mathbf{pq} - \mathbf{qp}.$$

Из (11) и (35) следует, что

$$\dot{\mathbf{d}} = \dot{\mathbf{p}}\mathbf{q} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{q}}\mathbf{p} - \mathbf{q}\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{q}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}\mathbf{q} + \mathbf{p}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} - \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}\mathbf{p}.$$

Учитывая (22) и (23), получаем, что $\dot{\mathbf{d}} = 0$ и $\mathbf{d}$ — диагональная матрица. Но именно диагональные члены матрицы $\mathbf{d}$, удовлетворяют условию квантования (37). При помощи единичной матрицы $\mathbf{1}$, заданной соотношением (6), все, что нам удалось установить о свойствах матрицы $\mathbf{d}$, можно записать в виде равенства

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i}\mathbf{1}. \tag{38}$$

Мы назовем его *«уточненным условием квантования»* и будем использовать во всех дальнейших выводах.

Из соотношения (38) следует, что если из него выведено некоторое равенство (A), то оно останется в силе при перестановке матриц $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, и одновременной замене h на $-h$. Например, из двух соотношений

$$\mathbf{p}^n\mathbf{q} = \mathbf{q}\mathbf{p}^n + n\frac{h}{2\pi i}\mathbf{p}^{n-1}, \tag{39}$$

$$\mathbf{q}^n\mathbf{p} = \mathbf{p}\mathbf{q}^n - n\frac{h}{2\pi i}\mathbf{q}^{n-1} \tag{39'}$$

требуется доказать лишь одно, что легко делается по индукции из равенства (38).

[9] Они не принадлежат также и к классу «ограниченных» бесконечных матриц, изучению которых посвящено подавляющее большинство математических работ.

Докажем теперь закон сохранения энергии и условие частот в том виде, о котором говорилось выше, сначала для случая, когда

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1(\mathbf{p}) + \mathbf{H}_2(\mathbf{q}).$$

Как показано в главе 1, § 1, $\mathbf{H}_1(\mathbf{p})$ и $\mathbf{H}_2(\mathbf{q})$ можно разложить в формальные степенные ряды

$$\mathbf{H}_1 = \sum_s a_s \mathbf{p}^s, \quad \mathbf{H}_2 = \sum_s b_s \mathbf{q}^s.$$

Из формул (39), (39′) получаем:

$$\begin{aligned} \mathbf{Hq} - \mathbf{qH} &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}, \\ \mathbf{Hp} - \mathbf{pH} &= -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}. \end{aligned} \tag{40}$$

Сравнивая с уравнениями движения (35), приходим к соотношениям

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{q}} &= \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Hq} - \mathbf{qH}), \\ \dot{\mathbf{p}} &= \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Hp} - \mathbf{pH}). \end{aligned} \tag{41}$$

Если матрицу $\mathbf{Hg} - \mathbf{gH}$ для кратности обозначить $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{g}\end{matrix}\right|$, то

$$\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{ab}\end{matrix}\right| = \left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{a}\end{matrix}\right|\mathbf{b} + \mathbf{a}\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{b}\end{matrix}\right|. \tag{42}$$

Отсюда следует, что для любой матрицы $\mathbf{g} = \mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ выполняется соотношение

$$\dot{\mathbf{g}} = \frac{2\pi i}{h}\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{g}\end{matrix}\right| = \frac{2\pi i}{h}(\mathbf{Hg} - \mathbf{gH}). \tag{43}$$

Чтобы доказать его, достаточно представить $\mathbf{g}$ как функцию от $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, $\dot{\mathbf{p}}$, $\dot{\mathbf{q}}$ и $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{g}\end{matrix}\right|$ при помощи соотношений (11), (11′), а $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$ — как функцию от $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{p}\end{matrix}\right|$ и $\left|\begin{matrix}\mathbf{H}\\ \mathbf{q}\end{matrix}\right|$ при помощи соотношений (42) и воспользоваться соотношениями (41). В частности, полагая в (43) $\mathbf{g} = \mathbf{H}$, получаем

$$\dot{\mathbf{H}} = 0. \tag{44}$$

После того, как закон сохранения энергии доказан и установлено, что $\mathbf{H}$ — диагональная матрица, соотношения (41) принимают вид

$$\begin{aligned} h\nu(n, m)q(n, m) &= \big(H(n, n) - H(m, m)\big)q(n, m), \\ h\nu(n, m)p(n, m) &= \big(H(n, n) - H(m, m)\big)p(n, m), \end{aligned}$$

откуда следует условие частот.

Если перейти к функциям Гамильтона более общего вида $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, то, как нетрудно понять из примеров (достаточно выбрать хотя бы $\mathbf{H}^* = \mathbf{p}^2\mathbf{q}$), в общем

случае равенство $\dot{\mathbf{H}}^* = 0$ не выполняется. Но функция Гамильтона $\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}^2\mathbf{q} + \mathbf{q}\mathbf{p}^2)$ приводит к тем же уравнениям движения, что и $\mathbf{H}^*$, но производная по времени $\dot{\mathbf{H}}$ снова равна нулю. Учитывая это, мы формулируем закон сохранения энергии и условие частот следующим образом. *Для каждой функции* $\mathbf{H}^* = \mathbf{H}^*(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ *существует такая функция* $\mathbf{H} = \mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$*, что* $\mathbf{H}^*$ *и* $\mathbf{H}$ *как функции Гамильтона порождают одни и те же уравнения движения и* $\mathbf{H}$ *играет в этих уравнениях движения роль постоянной во времени энергии, удовлетворяющей условию частот.*

В силу приведенных выше соображений достаточно доказать, что данная функция $\mathbf{H}$ помимо уравнений

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial \mathbf{H}^*}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}^*}{\partial \mathbf{q}} \tag{45}$$

удовлетворяет уравнениям (40). Как показано в главе 1, § 1, функция $\mathbf{H}^*$ представима в виде формальной суммы произведений степеней $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, и вследствие линейности уравнений (40) и (45) по $\mathbf{H}$ каждому слагаемому в разложении $\mathbf{H}^*$ можно поставить в соответствие определенный член в разложении $\mathbf{H}$. Таким образом, необходимо рассмотреть лишь случай

$$\mathbf{H}^* = \prod_{j=1}^{k} (\mathbf{p}^{s_j}\mathbf{q}^{r_j}). \tag{46}$$

Как показано в главе 1, § 2, равенства (45) будут выполнены, если $\mathbf{H}$ представить в виде линейной комбинации тех произведений степеней $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, которые получаются из $\mathbf{H}^*$ при циклической перестановке множителей (необходимо лишь, чтобы сумма коэффициентов была равна 1). Несколько труднее ответить на вопрос, как следует выбирать эти коэффициенты, чтобы удовлетворить одновременно и уравнениям (40). Достаточно ограничиться случаем $k = 1$, то есть выбрать

$$\mathbf{H}^* = \mathbf{p}^s\mathbf{q}^r. \tag{47}$$

Формула (39) допускает обобщение[10]:

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n\mathbf{p}^m = m\frac{h}{2\pi i}\sum_{l=0}^{n-1} \mathbf{q}^{n-1-l}\mathbf{p}^{m-l}\mathbf{q}^l. \tag{48}$$

При $n = 1$ мы снова получаем соотношение (39). В общем случае (48) следует из того, что в силу (39)

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^{n+1} - \mathbf{q}^{n+1}\mathbf{p}^m = (\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n\mathbf{p}^m)\mathbf{q} + m\frac{h}{2\pi i}\mathbf{q}^n\mathbf{p}^{m+1}.$$

[10] Другое обобщение определяется формулами

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n = \sum_{j=0}^{m,n} j!\binom{m}{j}\binom{n}{j}\left(\frac{h}{2\pi i}\right)^j \mathbf{q}^{n-j}\mathbf{p}^{m-j},$$

$$\mathbf{q}^n\mathbf{p}^m = \sum_{j=0}^{m,n} j!\binom{m}{j}\binom{n}{j}\left(-\frac{h}{2\pi i}\right)^j \mathbf{p}^{m-j}\mathbf{q}^{n-j},$$

где j возрастает до меньшего из чисел m, n.

Переставляя матрицы $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ и изменяя знак перед h, получаем новую формулу

$$\mathbf{p}^m\mathbf{q}^n - \mathbf{q}^n\mathbf{p}^m = n\frac{h}{2\pi i}\sum_{j=0}^{m-1}\mathbf{p}^{m-1-j}\mathbf{q}^{n-1}\mathbf{p}^j. \tag{48'}$$

Сравнивая с (48), приходим к соотношению

$$\frac{1}{s+1}\sum_{l=0}^{s}\mathbf{p}^{s-l}\mathbf{q}^r\mathbf{p}^l = \frac{1}{r+1}\sum_{j=0}^{r}\mathbf{q}^{r-j}\mathbf{p}^s\mathbf{q}^j. \tag{49}$$

Мы утверждаем, что функции $\mathbf{H}^*$, имеющей вид (47), соответствует

$$\mathbf{H} = \frac{1}{s+1}\sum_{l=0}^{s}\mathbf{p}^{s-l}\mathbf{q}^r\mathbf{p}^l. \tag{50}$$

Доказать необходимо лишь соотношения (40) (для этого нам придется вспомнить формулу (18′) из главы 1, § 2).

Из (50) следует, что

$$\mathbf{Hp} - \mathbf{pH} = \frac{1}{s+1}\left(\mathbf{q}^r\mathbf{p}^{s+1} - \mathbf{p}^{s+1}\mathbf{q}^r\right).$$

Если учесть соотношение (48), то полученная формула эквивалентна нижнему равенству (40).

Используя соотношение (49), получаем

$$\mathbf{Hq} - \mathbf{qH} = \frac{1}{r+1}\left(\mathbf{p}^s\mathbf{q}^{r+1} - \mathbf{q}^{r+1}\mathbf{p}^s\right).$$

Если учесть соотношение (48), то эта формула эквивалентна верхнему равенству (40). Тем самым наше утверждение полностью доказано.

Если в классической механике постоянство энергии $\dot{\mathbf{H}} = 0$ можно «вычитать» непосредственно из канонических уравнений, то в квантовой механике, как мы видели, закон сохранения энергии $\dot{\mathbf{H}} = 0$ не лежит на поверхности столь открыто.

В том, что вывод закона сохранения энергии из принятых предположений далеко не тривиален, нетрудно убедиться, если попытаться доказать постоянство функции $\mathbf{H}$ так же, как это делается в классической механике — прямым вычислением производной $\dot{\mathbf{H}}$. Сначала $\dot{\mathbf{H}}$ нужно представить при помощи соотношений (11) и (11′) как функцию от $\mathbf{p}, \mathbf{q}$ и $\dot{\mathbf{p}}, \dot{\mathbf{q}}$, а затем вместо $\dot{\mathbf{p}}$ и $\dot{\mathbf{q}}$ подставить $-\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}$ и $\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}}$. В результате мы получим $\dot{\mathbf{H}}$ как функцию от $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$. Соотношение (38) и выведенная из него формула, помещенная в примечании 11) позволяют разложить эту функцию в сумму членов $a\mathbf{p}^s\mathbf{q}^r$. Требуется доказать, что все коэффициенты a этого разложения равны нулю. Соответствующие вычисления для самого общего (в остальном — вполне реализуемого) случая настолько сложны[11)], что выполнить их не представляется возможным. В том, что, несмотря на все трудности, закон сохранения энергии и условие частот удается доказать в столь общем виде, мы усматриваем подтверждение наших надежд на создание теории, содержащей глубокие физические законы.

[11)] Для случая $\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + \mathbf{U}(\mathbf{q})$ их можно легко и быстро провести, если воспользоваться соотношением (39).

В заключение мы хотели бы сформулировать утверждение, легко следующее из формул этого раздела: *соотношения* (35), (37) *можно заменить соотношениями* (38) *и* (44) *(где* **H** *означает энергию) и определить частоты из условия частот.*

В дальнейшем мы неоднократно будем сталкиваться с важными приложениями этого утверждения.

Глава 3
ИССЛЕДОВАНИЕ АНГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Ангармонический осциллятор с

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + \frac{\omega_0^2}{2}\mathbf{q}^2 + \frac{1}{3}\lambda\mathbf{q}^3 \tag{51}$$

был подробно рассмотрен еще Гейзенбергом. Тем не менее мы посвятим ему новое исследование с тем, чтобы получить самое *общее решение* основных уравнений для этого случая. Если основные уравнения теории действительно полны и не требуют введения вспомогательных предположений, то абсолютные величины $|q(n,m)|$, $|p(n,m)|$ элементов матриц $\mathbf{q}$ и $\mathbf{p}$ должны *однозначно* определяться из уравнений. Убедимся в этом на примере ангармонического осциллятора (51). Что же касается фаз $\varphi_{n,m}$, $\psi_{n,m}$ в

$$q(n,m) = |q(n,m)|e^{i\varphi_{n,m}},$$
$$p(n,m) = |p(n,m)|e^{i\psi_{n,m}},$$

то основные уравнения должны фиксировать их не однозначно, а лишь с некоторой неопределенностью. Точное установление степени этой неопределенности имело бы первостепенно значение, например, для статистики взаимодействия квантовых атомов с внешним излучением.

§ 1
Гармонический осциллятор

Исходным пунктом для наших рассуждений служит теория гармонического осциллятора. При малых λ движение, описываемое функцией Гамильтона (51), можно рассматривать, как возмущение гармонического колебания с энергией

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + \frac{\omega_0^2}{2}\mathbf{q}^2. \tag{52}$$

Но и в простой задаче о движении гармонического осциллятора проведенный Гейзенбергом анализ нуждается в дополнении. Оно касается некоторого существенного утверждения о виде решения, основанного на принципе соответствия. Поскольку в классической механике имеется лишь *одна* гармоническая составляющая, то Гейзенберг вводит матрицу, соответствующую лишь переходу между соседними состояниями, то есть имеющую вид

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} 0 & q^{(01)} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ q^{(10)} & 0 & q^{(12)} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q^{(21)} & 0 & q^{(23)} & 0 & \dots \end{pmatrix}. \tag{53}$$

Мы же стремимся построить теорию самостоятельно, не прибегая к помощи классической теории — не опираясь на принцип соответствия. Естественно поэтому

выяснить, нельзя ли матрицу вида (53) вывести из основных уравнений и, если нет, то какие дополнительные условия следует потребовать.

Из сказанного в главе 2, § 1 об инвариантности относительно перестановок строк и столбцов можно заключить, что вид матрицы (53) не определяется однозначно основными уравнениями. Действительно, если строки и столбцы подвергнуть одной и той же перестановке, то канонические уравнения и условие квантования останутся инвариантными, и мы получим новое решение, внешне отличное от прежнего. Но все решения, возникающие при одинаковых перестановках строк и столбцов, отличаются лишь способом записи, то есть нумерацией элементов. Докажем, что при помощи одной лишь перенумерации элементов решение всегда можно привести к виду (53). Уравнение движения

$$\ddot{\mathbf{q}} + \omega_0^2 \mathbf{q} = 0, \tag{54}$$

если записать его для элементов, примет вид

$$\left(\nu^2(n,m) - \nu_0^2\right) q(n,m) = 0, \tag{55}$$

где

$$\omega_0^2 = 2\pi\nu_0, \quad h\nu(n,m) = W_n - W_m.$$

Из уточненного условия квантования

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i}\mathbf{1} \tag{56}$$

следует, что для каждого n должно существовать такое n', при котором $q(n,n') \neq 0$. Действительно, если бы при каком-то n все $q(n,n')$ обратились в нуль, то n-й диагональный член матрицы $\mathbf{pq} - \mathbf{qp}$ был бы равен нулю, что противоречит условию квантования. Далее из соотношения (55) мы заключаем, что всегда существует такое n', при котором

$$|W_n - W_{n'}| = h\nu_0.$$

Поскольку мы исходим из предположения о том, что $W_n \neq W_m$ при $n \neq m$, то могут существовать не более чем *два* таких индекса n' и n''. Действительно, соответствующие значения $W_{n'}$, $W_{n''}$ являются корнями квадратного уравнения

$$(W_n - x)^2 = h^2\nu_0^2,$$

и если существуют *два* таких индекса n' и n'', то частоты должны удовлетворять соотношению

$$\nu(n,n') = -\nu(n,n''). \tag{57}$$

Из уточненного условия квантования (56) получаем

$$\sum_k \nu(k,n)|q(n,k)|^2 = \nu(n',n)\left\{|q(n,n')|^2 - |q(n,n'')|^2\right\} = \frac{h}{8\pi^2}, \tag{58}$$

а энергия (52) определяется выражением

$$H(n,m) = \frac{1}{2}4\pi^2 \sum_k \left\{-\nu(n,k)\nu(k,m)q(n,k)q(k,m) + \nu_0^2 q(n,k)q(k,m)\right\} =$$
$$= 2\pi^2 \sum_k q(n,k)q(k,m)\left\{\nu_0^2 - \nu(n,k)\nu(k,m)\right\}.$$

В частности, при $m = n$ находим:

$$H(n,n) = W_n = 4\pi^2\nu_0^2\left(|q(n,n')|^2 + |q(n,n'')|^2\right). \tag{59}$$

Возможны три случая:

а) индекс n'' не существует, и $W_{n'} > W_n$,
б) индекс n'' не существует, и $W_{n'} < W_n$,
в) индекс n'' существует.

Рассмотрим теперь в случае б) вместо n индекс n'. Ему соответствуют не более двух значений $(n')'$ и $(n')''$, одно из которых должно быть равно n. Тем самым мы приходим либо к случаю а), либо к случаю в) и можем исключить случай б) из рассмотрения.

В случае а) $\nu(n',n) = +\nu_0$, и из соотношения (58) мы получаем

$$\nu_0^2|q(n,n')|^2 = \frac{h}{8\pi^2}, \tag{60}$$

а из (59) —

$$W_n = H(n,n) = 4\pi^2\nu_0^2|q(n,n')|^2 = \frac{1}{2}\nu_0 h.$$

По предположению, $W_n \neq W_m$ при $n \neq m$. Следовательно, в случае а) существует не более чем один индекс $n = n_0$.

Если такой индекс n_0, существует, то можно задать числовую последовательность

$$n_0, n_1, n_2, n_3, \ldots$$

так, чтобы

$$(n_k)' = n_{k+1} \quad \text{и} \quad W_{k+1} > W_k.$$

Тогда при любом k

$$(n_{k+1})'' = n_k.$$

Таким образом, при $k > 0$ из (58) и (59) следует, что

$$H(n_k,n_k) = 4\pi^2\nu_0^2\left\{|q(n_k,n_{k+1})|^2 + |\dot{q}(n_k,n_{k-1})|^2\right\}, \tag{61}$$

$$\frac{1}{2}h = 4\pi^2\nu_0^2\left\{|q(n_k,n_{k+1})|^2 - |q(n_k,n_{k-1})|^2\right\}. \tag{62}$$

Из (60) и (61) получаем

$$|q(n_k,n_{k+1})|^2 = \frac{h}{8\pi^2\nu_0}(k+1), \tag{63}$$

и, подставляя в (61), находим

$$W_{n_k} = H(n_k,n_k) = \nu_0 h\left(k + \frac{1}{2}\right). \tag{64}$$

Остается выяснить, не может ли случай а) не выполняться ни при каком n. Если бы это было так, то, начав с произвольного n_0, мы могли бы найти $n_0' = n_1$ и $n_0'' = n_{-1}$ из полученных значений в свою очередь сопоставить $n_1' = n_2$, $n_1'' = n_0$ и $n_{-1}' = n_0$, $n_{-1}'' = n_{-2}$ и т.д. В результате мы получили бы числовую последовательность

$$\ldots, n_{-2}, n_{-1}, n_0, n_1, n_2, \ldots, \tag{65}$$

и при каждом k от $-\infty$ до $+\infty$ выполнялись бы соотношения (61) и (62). Но это невозможно, так как в силу соотношения (62) величины $x_k = |q(n_{k+1}, n_k)|^2$ образуют эквидистантную числовую последовательность, а так как они положительны, то среди них должна существовать наименьшая величина. Обозначив соответствующий индекс через n_0, мы возвращаемся к предыдущему случаю. Таким образом, формулы (63) и (64) и на этот раз остаются в силе.

Нетрудно видеть, что среди чисел n_k содержится любое число n: в противном случае, приняв n за начальный член, мы могли бы построить новую последовательность (65), причем формула (60) выполнялась бы по-прежнему. Но тогда начальным членом обеих последовательностей соответствовало бы одно и то же значение $W_n = H(n, n)$, что невозможно.

Итак, доказано, что из индексов $0, 1, 2, 3, \ldots$ можно построить новую последовательность $n_0, n_1, n_2, n_3, \ldots$, для которой выполняются формулы (63) и (64). В новых индексах решение принимает форму (53) Гейзенберга. Таким образом, решение (53) можно рассматривать как нормальную форму общего решения. Как следует из (64), нормальная форма обладает тем свойством, что

$$W_{n_{k+1}} > W_{n_k}.$$

Наоборот, если потребовать, чтобы величина $W_n = H(n, n)$ с увеличением n возрастала, то мы с необходимостью получим, что $n_k = k$. Таким образом, этот принцип однозначно определяет нормальную форму. Но фиксируется лишь способ записи решения, и вычисления становятся более обозримыми. *Физически* же ничего нового мы не получаем.

В этом — глубокое отличие нашего подхода от прежнего полуклассического способа определения стационарных состояний. Траектории, вычисленные по классической теории, заполняют сплошь все пространство, вследствие чего и в дополнительно выделенных квантованных траекториях заранее заложена определенная числовая последовательность. Новая механика считает истинной теорию дисконтинуума, поэтому в ней речь идет не о последовательности квантовых состояний, определяемой физическим процессом, а о квантовых числах, представляющих собой не что иное, как различающие индексы, которые можно упорядочивать и нормировать из соображений удобства (например, по возрастающим энергиям W_n).

§2

Ангармонический осциллятор

Уравнения движения

$$\ddot{\mathbf{q}} + \omega_0^2 \mathbf{q} + \lambda \mathbf{q}^2 = 0 \tag{66}$$

вместе с условием квантования приводят к следующей системе уравнений для матричных элементов:

$$\begin{gathered}
\left(\omega_0^2 - \omega^2(n, m)\right) q(n, m) + \lambda \sum_k q(n, k) q(k, m) = 0, \\
\sum_k \omega(n, k) q(n, k) q(k, n) = -\frac{h}{4\pi}.
\end{gathered} \tag{67}$$

Будем искать решение системы в виде разложений

$$\begin{aligned}
\omega(n, m) &= \omega^0(n, m) + \lambda \omega^{(1)}(n, m) + \lambda^2 \omega^{(2)}(n, m) + \ldots, \\
q(n, m) &= q^0(n, m) + \lambda q^{(1)}(n, m) + \lambda^2 q^{(2)}(n, m) + \ldots .
\end{aligned} \tag{68}$$

При $\lambda = 0$ мы получаем рассмотренный в предыдущем разделе случай гармонического осциллятора и записываем решение (53) в виде

$$q^0(n,m) = a_n\delta_{n,m-1} + \bar{a}_m\delta_{n-1,m}, \tag{69}$$

где черта сверху означает комплексно-сопряженную величину. Если матрицу $q^0 = \big(q^0(n,m)\big)$ возвести в квадрат или в более высокую степень, то получатся матрицы того же вида, а именно суммы членов

$$(\xi)^{(p)}_{n,m} = \xi_n\delta_{n,m-p} + \overline{\xi_m}\delta_{n-p,m}. \tag{70}$$

Это наводит на мысль искать решение в виде

$$\begin{aligned} q^0(n,m) &= (a)^{(1)}_{nm},\\ q^{(1)}(nm) &= (x)^0_{nm} + (x')^{(2)}_{nm},\\ q^{(2)}(nm) &= (y)^{(1)}_{nm} + (y')^{(3)}_{nm},\\ &\dots\dots\dots\dots\dots\dots \end{aligned} \tag{71}$$

(нечетные и четные значения индекса p чередуются).

Действительно, если подставить разложения в уравнения (67), приравнять нулю коэффициенты при степенях λ

$$\lambda\begin{cases} (\omega_0^2 - \omega^0(n,m)^2)q^{(1)}(n,m) - 2\omega^0(n,m)\omega^{(1)}(n,m)q^0(n,m) +\\ \quad + \sum\limits_k q^0(n,k)q^0(k,m) = 0,\\ \sum\limits_k \{\omega^0(n,k)\big(q^0(n,k)q^{(1)}(k,n) + q^{(1)}(n,k)q^0(k,n) +\\ \quad + \omega^{(1)}(n,k)q^0(n,k)q^0(k,n)\} = 0, \end{cases} \tag{72}$$

$$\lambda^2\begin{cases} (\omega_0^2 - \omega^0(n,m)^2)q^{(2)}(n,m) - 2\omega^0(n,m)\omega^{(1)}(n,m)q^{(1)}(n,m) -\\ \quad - \big(\omega^{(1)}(n,m)^2 + 2\omega^0(n,m)\omega^{(2)}(n,m)\big)q^0(n,m) +\\ \quad + \sum\limits_k \big(q^0(n,k)q^{(1)}(k,m) + q^{(1)}(n,k)q^0(k,m)\big) = 0,\\ \sum\limits_k \{\omega^0(n,k)\big(q^0(n,k)q^{(2)}(k,m) + q^{(1)}(n,k)q^{(1)}(k,m) +\\ \quad + q^{(2)}(n,k)q^0(k,m)\big) + \omega^{(1)}(n,k)\big(q^0(n,k)q^{(1)}(k,m) +\\ \quad + q^{(1)}(n,k)q^0(k,m)\big) + \omega^2(n,k)q^0(n,k)q^0(k,m)\} = 0 \end{cases} \tag{73}$$

и учесть правило умножения

$$\begin{aligned} \sum_k \Omega_{nkm}(\xi)^{(p)}_{nk}(\eta)^{(q)}_{km} = {} & \Omega_{n,n+p,n+p+q}\xi_n\eta_{m+p}\delta_{n,m-p-q} +\\ & + \Omega_{n,n+p,n+p-q}\xi_n\overline{\eta}_{n+p-q}\delta_{n,m-p+q} +\\ & + \Omega_{n,n-p,n-p+q}\overline{\xi}_{n-p}\eta_{n-p}\delta_{n,m+p-q} +\\ & + \Omega_{n,n-p,n-p-q}\overline{\xi}_{n-p}\eta_{n-p-q}\delta_{n,m+p+q}, \end{aligned} \tag{74}$$

то, приравняв нулю коэффициенты при $\eta_{n,m-s}$, мы убедимся, что соотношение (71) позволяет удовлетворить всем условиям и высшие члены в (71) обращаются в нуль тождественно.

Вычисления приводят к следующим результатам.

Первое из уравнений (72) при подстановке выражений (71) дает:

$$\begin{aligned} 2\omega_0^2 x_n + |a_n|^2 + |a_{n-1}|^2 &= 0, \\ -3\omega_0^2 x_n' + a_n a_{n+1} &= 0, \\ \omega^{(1)}_{n,n-1} &= 0, \end{aligned} \tag{75}$$

второе уравнение выполняется тождественно. Таким образом,

$$\begin{aligned} x_n &= -\frac{|a_n|^2 + |a_{n-1}^2|}{2\omega_0^2}, \\ x_n' &= \frac{a_n a_{n+1}}{3\omega_0^2}. \end{aligned} \tag{76}$$

Из первого уравнения (73) получаем:

$$\begin{aligned} 2\omega_0 a_n \omega^{(2)}_{n,n+1} + 2a_n x_{n+1} + 2a_n x_n + \bar{a}_{n-1} x_{n-1}' + \bar{a}_{n+1} x_n' &= 0, \\ -8\omega_0^2 y_n' + a_n x_{n+1}' + a_{n+2} x_n' &= 0, \\ \omega^{(1)}_{n,n-2} &= 0, \end{aligned} \tag{77}$$

второе уравнение выполняется не тождественно, а порождает определяющее уравнение для y_n:

$$\begin{aligned} a_n \overline{y}_n + \bar{a}_n y_n - a_{n-1}\overline{y}_{n-1} - \bar{a}_{n-1} y_{n-1} + 2|x'|^2 - 2|x_{n-2}'|^2 &= 0, \\ -\frac{\omega^{(2)}_{n,n+1}}{\omega_0}|a_n|^2 - \frac{\omega^{(2)}_{n,n-1}}{\omega_0}|a_{n-1}|^2 &= 0. \end{aligned} \tag{78}$$

Решение имеет вид

$$\begin{aligned} \omega^{(2)}_{n,n+1} &= \frac{1}{3\omega_0^3}\left(|a_{n+1}|^2 + |a_{n-1}^2| + 3|a_n|^2\right), \\ y_n' &= \frac{1}{12\omega_0^4} a_n a_{n+1} a_{n+2}. \end{aligned} \tag{79}$$

Если для краткости положить

$$\eta_n = a_n \overline{y}_n + \bar{a}_n y_n, \tag{80}$$

то η определяется из уравнения

$$\eta_n - \eta_{n-1} = \frac{1}{\omega_0^4}\left(|a_n|^4 - |a_{n-1}|^4 + \frac{1}{9}|a_n|^2|a_{n+1}|^2 - \frac{1}{9}|a_{n-1}|^2|a_{n-2}|^2\right). \tag{81}$$

Формулы (76) и (79) показывают, что величины x_n, x_n', y_n' выражаются через решение нулевого приближения a_n. Их фазы также определяются фазами соответствующих величин гармонического осциллятора. Иначе обстоит дело с величинами y_n:

хотя η_n однозначно определяется уравнением (81), соотношение (80) не позволяет полностью определить y_n. Возможно, что дополнительные определяющие уравнения для y_n возникают в следующем приближении. Мы вынуждены оставить этот вопрос открытым. В то же время нам хотелось бы подчеркнуть его принципиальное значение для замкнутости всей теории. Ответы на все статистические вопросы зависят от того, верно ли наше предположение, что в каждой строке (или в каждом столбце) матрицы $\mathfrak{q}$ остается неопределенной фаза лишь *одного* элемента $q(n, m)$.

В заключение мы хотим привести явные формулы, которые получаются, если подставить найденное ранее (в главе 3, § 1) решение для гармонического осциллятора. В нормальной форме, следующей из (63), оно имеет вид

$$a_n = \sqrt{C(n+1)}e^{i\varphi_n}, \quad C = \frac{h}{4\pi\omega_0} = \frac{h}{8\pi^2\nu_0}. \tag{82}$$

Из соотношений (76), (79) и (81) получаем:

$$\begin{aligned} x_n &= -\frac{C}{2\omega_0^2}(2n+1), \\ x'_n &= \frac{C}{3\omega_0^2}\sqrt{(n+1)(n+2)}e^{i(\varphi_n+\varphi_{n+1})}, \\ y'_n &= \frac{\sqrt{C^3}}{12\omega_0^4}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}e^{i(\varphi_n+\varphi_{n+1}+\varphi_{n+2})}; \end{aligned} \tag{83}$$

$$\begin{aligned} &\omega^{(1)}_{n,n-1} = 0, \quad \omega^{(1)}_{n,n-2} = 0, \\ &\omega^{(2)}_{n,n-1} = -\frac{5}{3}\frac{C}{\omega_2^3}n \end{aligned} \tag{84}$$

и, следовательно,

$$\eta_n - \eta_{n-1} = \frac{11}{9}\frac{C^2}{\omega_0^4}(2n+1),$$

$$\eta_n = a_n\bar{y}_n + \bar{a}_n y_n = \frac{11}{9}\frac{C^2}{\omega_0^4}(n+1)^2.$$

Если положить $y_n = |y_n|e^{i\psi_n}$, то

$$|y_n|\cos(\varphi_n - \psi_n) = \frac{\eta_n}{2|a_n|} = \frac{11}{18}\frac{\sqrt{C^3}}{\omega_0^4}\left(\sqrt{n+1}\right)^3. \tag{85}$$

Сказать что-либо еще относительно y_n в этом приближении невозможно.

Последние формулы мы хотим выписать еще раз в предположении, что $\psi_n = \varphi_n$. С точностью до членов выше второго порядка по λ получаем:

$$\begin{aligned} \omega(n, n-1) &= \omega_0 - \lambda^2\frac{5}{3}\frac{C}{\omega_0^3}n + \ldots, \\ \omega(n, n-2) &= 2\omega_0 + \ldots, \end{aligned} \tag{86}$$

$$
\begin{aligned}
q(n,n) &= -\lambda\frac{C}{\omega_0^2}(2n+1)+\ldots,\\
q(n,n-1) &= \sqrt{Cn}e^{i\varphi_{n-1}}\left(1+\lambda^2\frac{11}{18}\frac{Cn}{\omega_0^4}+\ldots\right),\\
q(n,n-2) &= \lambda\frac{C}{3\omega_0^2}\sqrt{n(n-1)}e^{i(\varphi_{n-1}+\varphi_{n-2})}+\ldots,\\
q(n,n-3) &= \lambda^2\frac{\sqrt{C^3}}{12\omega_0^4}\sqrt{n(n-1)(n-2)}e^{i(\varphi_{n-1}+\varphi_{n-2}+\varphi_{n-3})}+\ldots.
\end{aligned}
\tag{87}
$$

Энергию удается вычислить в явном виде. Она определяется выражением

$$
W_n = h\nu_0\left(n+\frac{1}{2}\right)-\lambda^2\frac{5}{3}\frac{C^2}{\omega_0^2}\left(n(n+1)+\frac{17}{30}\right)+\ldots. \tag{88}
$$

Условие частот выполняется, так как с учетом соотношений (82) имеем:

$$
\begin{aligned}
W_n - W_{n-1} &= h\nu_0 - \lambda^2\frac{2C^2}{\omega_0^2}n+\ldots = \frac{h}{2\pi}\omega(n,n-1),\\
W_n - W_{n-2} &= 2h\nu_0+\ldots = \frac{h}{2\pi}\omega(n,n-2).
\end{aligned}
$$

С формулой (88) можно связать замечание Гейзенберга о том, что отклонение от классической теории возникает уже в членах низшего порядка и устранить его формально можно введением «полуцелого» квантового числа $n' = n + 1/2$. В остальном полученное нами в (86) выражение для $\omega(n, n-1)$ *в точности совпадает* с частотами, вычисленными на основании классической теории. Действительно, классическая энергия определяется выражением [12)]

$$
W_n^{(kl)} = h\nu_0 n - \lambda^2\frac{5}{3}\frac{C^2}{\omega_0^2}n^2+\ldots,
$$

вследствие чего классическая частота оказывается равной

$$
\omega_{kl} = \frac{1}{h}\frac{\partial W_n^{(kl)}}{\partial n} = h\nu_0 - \lambda^2\frac{5}{3}\frac{C^2}{\omega_0^2}n+\ldots = \omega_{qu}(n,n-1) = \frac{1}{h}\left(W_n^{(qu)} - W_{n-1}^{(qu)}\right).
$$

Тем самым доказано, что выражение (88) (с точностью до аддитивной постоянной) можно вывести и из формулы возмущений Крамерса—Борна.

Глава 4

НЕКОТОРЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ ПО ЭЛЕКТРОДИНАМИКЕ

По Гейзенбергу, если $\mathbf{q}$ — декартова координата, то квадраты абсолютных величин $|q(n,m)|^2$ элементов матрицы $\mathbf{q}$ служат мерой *вероятностей* переходов.

[12)] См. *Born M.* Atommechanik. Berlin, 1925. Kap. 4, §42, S. 294. Для полного совпадения с полученным нами выражением в формуле (6) необходимо положить $a = 1/3$.

В заключение нашей работы мы хотели бы показать каким образом это предположение можно обосновать, исходя из более общих соображений. Для этого нам придется затронуть вопрос о том, как следует интерпретировать в смысле новой теории основные уравнения электродинамики. Необходимо, однако, подчеркнуть, что излагаемые ниже соображения носят сугубо предварительный характер. Они должны дать лишь общее представление о принципиальных основах нашего подхода к проблеме. Затронутые нами вопросы, в особенности отношение предлагаемой нами теории к теории квантов света, будут подробно изложены в дальнейшем.

Здесь же мы хотим обсудить лишь такие вопросы, которые не требуют знания точной формы условия квантования для системы со многими степенями свободы. В том, что при этом удается достаточно далеко продвинуться в электродинамике, нетрудно убедиться из следующих соображений. *Полость с электромагнитными колебаниями* представляет собой систему *с бесконечно большим числом степеней свободы*. Тем не менее для анализа собственных колебаний такой полости вполне пригодны доказанные в предыдущих параграфах теоремы, относящиеся к системам с *одной* степенью свободы, поскольку полость с электромагнитным излучением эквивалентна системе *несвязанных осцилляторов*. В том, что такую систему можно проанализировать до конца, нет ни малейших сомнений. Особое значение при этом имеет линейность основных уравнений электромагнитного поля (принцип суперпозиции). Именно из линейности уравнений следует, что эрзац-осцилляторы *гармонические*, а именно для гармонического осциллятора (в отличие от других систем) закон сохранения энергии выполняется независимо от условия квантования: из

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2}(\mathbf{p}^2 + \omega_0^2\mathbf{q}^2)$$

мы получаем

$$\dot{\mathbf{H}} = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{p}}\mathbf{p} + \mathbf{p}\dot{\mathbf{p}} + \omega_0^2\dot{\mathbf{q}}\mathbf{q} + \omega_0^2\mathbf{q}\dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2}\omega_0^2(-\mathbf{q}\mathbf{p} - \mathbf{p}\mathbf{q} + \mathbf{p}\mathbf{q} + \mathbf{q}\mathbf{p}) = 0.$$

Можно надеяться поэтому, что интегральные соотношения электродинамики вакуума (закон сохранения энергии и импульса) удастся получить в общем виде из матричных аналогов уравнений Максвелла, не используя условие квантования. Доказав это, мы тем самым обоснуем утверждение Гейзенберга об интерпретации $|q(n, m)|^2$.

§ 1

Уравнения Максвелла, закон сохранения энергии и импульса

Условимся, как обычно, обозначать векторы готическими буквами, матрицы — полужирным и числа — светлым шрифтом. В выборе единиц мы будем следовать учебнику Абрагама[13].

Электромагнитные явления в вакууме можно описывать при помощи суперпозиции плоских волн. Напряженности электрического и магнитного поля $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}$ плоской волны мы будем считать *матрицами*, элементы которых имеют вид гармонических плоских волн. Это означает, что в надлежаще расположенной системе координат

$$\mathfrak{H} = \left(\mathfrak{H}(n, m)e^{2\pi i\nu(n,m)(t-x/c)}\right). \tag{89}$$

Разумеется, необходимо иметь в виду, что n и m, вообще говоря, принимают не дискретное множество значений и означают не отдельные числа, а наборы чисел (векторы).

[13] *Abraham M.* Theorie der Elekrizität, II. Leipzig, 1914.

Уравнения Максвелла сохраняют свой вид и в матричном варианте:

$$\operatorname{rot} \mathfrak{H} - \frac{1}{c}\dot{\mathfrak{E}} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathfrak{E} + \frac{1}{c}\dot{\mathfrak{H}} = 0. \tag{90}$$

Дифференцирование по x, y, z, t производится над каждым элементом матрицы в отдельности[14)].

Выведем закон сохранения энергии-импульса. Для этого необходимо сделать несколько предварительных замечаний относительно умножения матричных векторов.

Определим *скалярное произведение* соотношением

$$(\mathfrak{A}, \mathfrak{B}) = \mathfrak{A}\mathfrak{B} = \mathfrak{A}_x\mathfrak{B}_x + \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_y + \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_z, \tag{91}$$

а *векторное произведение* — соотношением

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{B}]_x = \mathfrak{A}_y\mathfrak{B}_z - \mathfrak{A}_z\mathfrak{B}_y. \tag{92}$$

Поскольку умножение матриц не коммутативно, то соотношения

$$\mathfrak{A}\mathfrak{B} = \mathfrak{B}\mathfrak{A}, \quad [\mathfrak{A}\mathfrak{B}] = -[\mathfrak{B}\mathfrak{A}]$$

вообще говоря, *не выполняются*.

Наоборот, мы утверждаем, что

$$\operatorname{div}[\mathfrak{A}\mathfrak{B}] = (\operatorname{rot} \mathfrak{A}, \mathfrak{B}) - (\mathfrak{A}, \operatorname{rot} \mathfrak{B}). \tag{93}$$

Плотность энергии $\mathbf{W}$ определим (как скалярную матрицу) соотношением

$$\mathbf{W} = \frac{1}{8\pi}(\mathfrak{E}^2 + \mathfrak{H}^2). \tag{94}$$

Тогда из (11) получаем:

$$8\pi\dot{\mathbf{W}} = \mathfrak{E}\dot{\mathfrak{E}} + \dot{\mathfrak{E}}\mathfrak{E} + \mathfrak{H}\dot{\mathfrak{H}} + \dot{\mathfrak{H}}\mathfrak{H},$$

а из (90) —

$$\frac{8\pi}{c}\dot{\mathbf{W}} = (\mathfrak{E}, \operatorname{rot} \mathfrak{H}) + (\operatorname{rot} \mathfrak{H}, \mathfrak{E}) - (\mathfrak{H}, \operatorname{rot} \mathfrak{E}) - (\operatorname{rot} \mathfrak{E}, \mathfrak{H}).$$

Следовательно (если воспользоваться соотношением (93)),

$$\dot{\mathbf{W}} + \operatorname{div} \mathfrak{S} = 0, \tag{95}$$

где

$$\mathfrak{S} = \frac{c}{8\pi}([\mathfrak{E}\mathfrak{H}] - [\mathfrak{H}\mathfrak{E}]). \tag{96}$$

Это — теорема Пойнтинга для матричной электродинамики, $\mathfrak{S}$ означает *вектор излучения*.

Аналогичным образом можно вывести и закон сохранения импульса. Определим максвелловские напряжения соотношениями

$$\mathbf{T}_{xx} = \frac{1}{8\pi}(\mathfrak{E}_x^2 - \mathfrak{E}_y^2 - \mathfrak{E}_z^2) + (\mathfrak{H}_x^2 - \mathfrak{H}_y^2 - \mathfrak{H}_z^2), \tag{97}$$

---

14) Иногда требуется иное описание электромагнитного поля, при котором пространственные координаты являются не числами, а матрицами. Это приводит к необходимости внести соответствующие изменения в интерпретацию частных производных по пространственным переменным в уравнениях Максвелла. К этому вопросу мы намерены вернуться в дальнейшем.

а плотность импульса излучения — соотношением

$$\mathfrak{g} = \frac{1}{c^2}\mathfrak{S} = \frac{1}{8\pi c}\left([\mathfrak{E}\mathfrak{H}] - [\mathfrak{H}\mathfrak{E}]\right). \tag{98}$$

Тогда, как показывают вычисления, аналогичные приведенным выше,

$$\dot{\mathfrak{g}}_x = \frac{\partial \mathrm{T}_{xx}}{\partial x} + \frac{\mathrm{T}_{xy}}{\partial y} + \frac{\partial \mathrm{T}_{xz}}{\partial z}. \tag{99}$$

Выведенные нами соотношения становятся особенно наглядными, если воспользоваться четырехмерными обозначениями теории относительности. Систематическое изложение четырехмерного векторного анализа и теории относительности на основе теории матриц с ее некоммутативным умножением будет дано в другом месте.

§ 2
Сферические волны. Излучение диполя

Поскольку мы ставим целью вычислить излучение осциллятора, необходимо теперь рассмотреть *сферические волны.*

Введем вектор Герца $\mathfrak{Z}$ как матричный вектор. Поля $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}$ связаны с $\mathfrak{Z}$ уравнениями

$$\mathfrak{E} = \operatorname{grad}\operatorname{div}\mathfrak{Z} - \frac{1}{c^2}\ddot{\mathfrak{Z}}, \quad \mathfrak{H} = \frac{1}{c}\operatorname{rot}\mathfrak{Z}, \tag{100}$$

В классической теории $\mathfrak{Z}$ для сферической волны пропорционален

$$\frac{1}{r}e^{2\pi i\nu(t-r/c)}.$$

Как известно, это выражение можно представить в виде суперпозиции плоских волн [15], если воспользоваться тождеством

$$\frac{e^{i\varkappa r}}{r} = \frac{i\varkappa}{2\pi}\int e^{i\varkappa(\mathfrak{r}\mathfrak{s})}d\omega, \tag{101}$$

где $\mathfrak{r}$ — числовой (не матричный) радиус-вектор, идущий из центра сферической волны в начало отсчета, $\mathfrak{s}$ — единичный вектор, $d\omega = d\mathfrak{s}_x\, d\mathfrak{s}_y\, d\mathfrak{s}_z$. Следовательно, в нашей теории из плоских волн, представленных матрицами вида (89), при интегрировании по направлению нормали к волновому фронту можно получать сферическую волну вида

$$\mathfrak{Z} = \left(e\mathfrak{q}(n,m)\frac{e^{2\pi i\nu(n,m)(t-r/c)}}{r}\right), \tag{102}$$

где матрица $e\mathfrak{q} = (e\mathfrak{q}(n,m))$ соответствует электрическому моменту, возбудившему волну.

Вычисления, позволяющие, исходя из представления (102), определить электромагнитное поле и излучение, совпадают с аналогичными вычислениями в классической теории, так как числовой вектор коммутирует с любой матрицей. Как

[15] См., например, *Debye P.* Ann. Phys., 1909, **30**, 755 (формула (7′), с. 758).

нетрудно проверить,

$$\mathfrak{H} = -\frac{e}{c^2}\frac{1}{r^2}[\mathfrak{r}\ddot{\mathfrak{q}}],$$
$$\mathfrak{E} = \frac{e}{c^2}\frac{1}{r^3}[\mathfrak{r}[\mathfrak{r}\ddot{\mathfrak{q}}]], \tag{103}$$

откуда

$$\mathfrak{S} = \frac{e}{4\pi c^3}\frac{\mathfrak{r}}{r}[\mathfrak{r}\ddot{\mathfrak{q}}]. \tag{104}$$

Интегрирование по всем направлениям производится так же, как в классической теории. Энергия, излучаемая в секунду, оказывается равной

$$\int \mathfrak{S}\, d\mathfrak{f} = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\ddot{\mathfrak{q}}^2. \tag{105}$$

Чтобы получить среднее излучение, выражение (105) необходимо усреднить по времени. При этом возникает диагональная матрица

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\overline{\ddot{\mathfrak{q}}^2}. \tag{106}$$

Если осциллятор колеблется вдоль некоторого фиксированного направления, то матричный вектор $\mathfrak{q}$ можно заменить матричным скаляром $\mathfrak{q} = (q(n, m))$ и получить излучение

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\overline{\ddot{\mathfrak{q}}^2} = \frac{32\pi^4 e^2}{3c^3}\left(\sum_k \nu(n,k)^4 |q(n,k)|^2\right). \tag{107}$$

Пока мы еще не в состоянии построить полную теорию излучения, которая бы позволяла однозначно сопоставлять отдельные члены ряда (107) стационарным состояниям: для этого было бы необходимо предварительно исследовать обратное действие излучения на осциллятор, то есть располагать теорией затухания. К разработке такой теории мы намерены обратиться в дальнейшем. Здесь же мы намереваемся лишь проверить, определяется ли излучение величинами $|q(n,k)|^2$. Из выражения (107) видно, что это действительно так, хотя входящие в него величины задают не все спонтанное излучение, исходящее из одного стационарного состояния. Действительно, спонтанные переходы происходят всегда только в состояния с меньшей энергией, или (при подходящей нумерации) в состояния с меньшим квантовым числом. Мы можем теперь чисто формально описать, каким образом это обстоятельство проявится в нашей теории. Для этого мы образуем не среднее, а *сумму диагональных элементов* матрицы излучения (105):

$$D\left(\frac{2e^2}{3c^3}\ddot{\mathfrak{q}}^2\right) = \frac{32\pi^4 e^2}{3c^3}\sum_{n,k} \nu(n,k)^4 |q(n,k)|^2. \tag{108}$$

Изменив порядок суммирования в правой части, преобразуем ее к виду

$$\frac{64\pi^4 e^2}{3c^3}\sum_n\left(\sum_{k<n} \nu(n,k)^4 |q(n,k)|^2\right). \tag{109}$$

Итак, требуемое соответствие достигнуто; каждому состоянию n, мы сопоставили излучение, вызванное переходами во все состояния $k < n$, причем каждый

переход порождает интенсивность, известную из классической теории. Если предположить, что индексы n расположены в порядке возрастания энергии W_n, то полученный результат совпадает с опытом.

Таким образом, предположение Гейзенберга обосновано в указанном выше ограниченном смысле.

В этой связи уместно подчеркнуть, что наше утверждение относительно вероятностей переходов не зависит от предположения о невырожденности системы, то есть о том, что все W_n различны.

В заключение мы хотели бы также отметить, что вместе с вероятностями переходов мы определяем также и *статистические веса* состояний, при этом каждому состоянию, характеризуемому одной строкой и одним столбцом или одним диагональным членом матрицы **W** следует приписать *один и тот же* статистический вес. Как будет показано в дальнейшем, этот результат (обобщенный на случай систем с несколькими степенями свободы) сам по себе приводит к основному принципу статистики Бозе—Эйнштейна квантов света.

Примечание при корректуре. Пока наша работа находилась в печати, мы совместно с В. Гейзенбергом разработали анонсированное нами обобщение теории на случай многих степеней свободы. Полученные результаты будут изложены в следующей работе, которую надлежит рассматривать, как продолжение данной. Там же мы дадим более подробное изложение многих вопросов, лишь затронутых в этой статье.

К КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. II*

Совместно с М. Борном и П. Иорданом

Квантовая механика, развитая в части I настоящей работы на основе предложенного Гейзенбергом исчисления, обобщена на системы с произвольным числом степеней свободы. Построена теория возмущений для невырожденных и большого класса вырожденных систем и показана ее связь с теорией собственных значений эрмитовых форм. Полученные результаты использованы для ввода правил квантования импульса и момента импульса, а также правил отбора и формул для интенсивностей. В заключение развитая теория применена к статистике собственных колебаний полости.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе предпринята попытка дальнейшего построения теории общей квантовотеоретической механики, физические и математические основы которой были заложены в двух предыдущих работах авторов [1]. Эту теорию удалось обобщить на случай систем с многими степенями свободы [2] (глава 2) и путем введения «канонических преобразований» свести задачу интегрирования уравнений движения к известным математических проблемам. При этом обнаружилась с одной стороны далеко идущая общность построенной теории канонических преобразований с классической теорией возмущений, а с другой стороны связь квантовой механики со столь разработанной математической теорией как теория квадратичных форм бесконечно большого числа переменных (глава 3). Прежде чем перейти к подробному изложению нашей теории, мы попытаемся более точно очертить ее физическое содержание.

Исходным пунктом для построения предлагаемой теории явилось убеждение в том, что трудности, с которыми в последние годы приходилось сталкиваться в квантовой теории буквально на каждом шагу, удается преодолеть не раньше, чем в механике движений атома и электронов будет построена математическая система соотношений между принципиально наблюдаемыми величинами, не уступающая по простоте аналогичной системе классической механики. Такая система квантовомеханических соотношений между наблюдаемыми величинами не может не выявить недостаток, присущий прежней квантовой теории: отсутствие прямой и наглядной геометрической интерпретации, обусловленное тем, что движение электронов не допускает описания в терминах общеизвестных понятий пространства и времени. Характерная особенность новой теории заключается в том, что она означает перестройку как кинематики, так и механики. Важное преимущество новой

* Zur Quantenmechanik. II. (Mit *M. Born* und *P. Jordan*). — Zs. Phys., 1926, **35**, 8–9, 557–615. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 879; *Born M., Jordan P.* Zs. Phys., 1925, **34**, 858. В дальнейшем при ссылках на эти работы будет указываться: часть I.

[2] *Примечание при корректуре.* В появившейся недавно работе Дирака (*Dirac P.* Proc. Roy. Soc. London, 1925, **109**, 642) независимо получены некоторые результаты, содержащиеся в части I и в настоящей работе, и указаны физические следствия из них.

теории состоит в том, что положенные в ее основу постулаты органически входят в новую механику как ее составная часть. Например, существование дискретных стационарных состояний для новой теории столь же естественно, как существование дискретных частот собственных колебаний для классической теории (см. главу 3). Что касается фундаментальных, связанных с основополагающими квантовотеоретическими постулатами различий между квантовой и классической теориями, то, по нашему мнению, формализм, излагаемый в двух цитированных выше работах и в настоящей статье, если только он окажется правильным, может рассматриваться как квантовая механика, обладающая весьма сильным сходством с классической механикой, о котором нельзя было и мечтать. В подтверждение мы сошлемся лишь на законы сохранения энергии и импульса, а также на вид уравнений движения (глава 1, § 2). Сильное сходство между новой и классической теорией проявляется, в частности, в том, что в новой теории не может быть и речи о некоем самостоятельном принципе соответствия. Более того, новую теорию можно рассматривать как точную формулировку принципа соответствия Бора. Важная задача дальнейшего развития новой теории состоит в более точном исследовании этого типа соответствия и описании перехода символической квантовой геометрии в наглядную классическую геометрию. Если иметь в виду этот вопрос, то особенно важное достоинство новой теории мы усматриваем в том, что в ней непрерывные спектры и линейчатые спектры атомов выступают равноправно, как решения одного и того же уравнения движения и математически тесно взаимосвязаны (см. главу 3, § 3). Различие между «квантованными» и «неквантованными» движениями в новой теории утрачивает всякий смысл, поскольку в ней нигде не фигурирует ни одно условие квантования, выделяющее определенные движения из огромного числа возможных движений. Вместо этого условия в теории имеется квантовомеханическое основное уравнение (глава 1, § 1), которое выполняется для всех возможных движений и необходимо для того, чтобы задача о движении вообще имела смысл.

Хотя математическое единообразие и простота предлагаемой теории позволяют утверждать, что она правильно передает существенные особенности истинного положения вещей в проблеме строения атома, необходимо отчетливо сознавать, что эта теория не может разрешать принципиальные трудности квантовой теории. Силы, соответствующие сопротивлению излучения классической теории, не учтены в предлагаемой теории, а относительно отношения проблемы связи к развиваемой квантовой механике в ней имеются лишь отдельные неявные указания (см. главу 1, § 5). Тем не менее, новая теория позволяет несколько иначе взглянуть на квантовотеоретические трудности и порождает более обоснованные, чем прежде, надежды на то, что впоследствии удается найти решение и этой проблемы. Возьмем хотя бы проблему, связанную с процессом столкновения. На принципиальные трудности, возникающие в старой теории, при попытке совместить основные постулаты квантовой теории с выполнением закона сохранения энергии при быстрых столкновениях, недавно указал Бор[3]. В предполагаемой нами теории и основные постулаты, и закон сохранения энергии являются математическими следствиями квантовомеханических уравнений, и результаты эксперимента Франка—Герца по столкновениям естественно вытекают из теории. Это позволяет надеяться на то, что в дальнейшем при решении проблемы столкновений на основе квантовой механики трудности указанного рода не возникнут именно из-за органической взаимосвязи основных постулатов с квантовой механикой.

С точки зрения предлагаемой нами теории комплекс вопросов, относящихся к аномальному эффекту Зеемана, выглядит почти так же, как с точки зрения существовавшей ранее теории. Правда, из содержащейся в исходных предпосылках

[3] *Bohr N.* Zs. Phys., 1925, **34**, 142.

нашей теории внутренней взаимосвязи между апериодическими и периодическими траекториями следует, что мы не можем быть уверенными в универсальности теоремы Лармора (глава 4, §2): предположения, при которых справедлива эта теорема, выполняются в случае осциллятора: но вообще говоря, не выполняются для атомного ядра. Сомнительно, чтобы избранная нами точка зрения позволила объяснить аномальный эффект Зеемана. В случае эффекта Зеемана нашей квантовой механике приходится преодолевать те же трудности, что и прежней теории. Новый этап в решении проблемы аномального эффекта Зеемана наступил недавно в связи с появлением заметки Уленбека и Гоудсмита[4)]. Эти авторы исходят из предположения о том, что электрон обладает собственным моментом импульса и магнитным моментом (отношение которых вдвое больше отношения аналогичных величин для атомов), из чего следует, что никакого аномального эффекта Зеемана в действительности не существует. Гипотеза Уленбека и Гоудсмита позволяет устранить все трудности, связанные со статистическими весами, и дает качественное объяснение всех явлений, имеющих отношение к проблеме структуры мультиплетов и эффекту Зеемана. Ответ на вопрос, удается ли таким способом достичь и количественного объяснения этого круга явлений, требует более точных исследований методами квантовой механики. Некоторые результаты относительно эффекта Зеемана, приведенные в главе 4, вселяют надежду на то, что в дальнейшем удастся добиться совпадения количественных предсказаний теории с экспериментом.

В заключение нашей работы мы попытались применить новые методы нашей теории к решению известной статистической проблемы. Как известно, при квантовании собственных колебаний полости (ограниченной зеркальными стенками) традиционные методы приводят к результатам, в которых нетрудно усмотреть определенную аналогию с утверждениями теории квантов света и выводом формулы Планка. Однако, как неизменно подчеркивал Эйнштейн[5)], при таком полуклассическом подходе к излучению в полости мы получаем неверное значение среднего квадрата флуктуаций энергии в части объема. Этот результат следует рассматривать как серьезное возражение против существующих ныне методов квантовой теории, поскольку, с одной стороны, речь идет о неспособности теории справиться с решением простой задачи о гармоническом осцилляторе, а с другой стороны указанная трудность возникает в статистике собственных колебаний любой механической системы, например кристаллической решетки. Мы обнаружили, что вычисления, произведенные на основе кинематики и механики предлагаемой нами теории, приводят к правильному значению квадрата флуктуации и к формуле Планка. Это обстоятельство также подтверждает правильность развиваемой нами квантовой механики.

Глава 1

СИСТЕМЫ С ОДНОЙ СТЕПЕНЬЮ СВОБОДЫ

§1

Основные принципы

I. Представлением квантовотеоретической величины a, будь то координата, импульс или любая функция координаты и импульса, служит совокупность величин

$$a(n,m)e^{2\pi i\nu(n,m)t}. \tag{1}$$

[4)] *Uhlenbeck G. E., Goudsmit S.* Naturwiss., 1925, **13**, 953.

[5)] *Einstein A.* Zs. Phys., 1909, **10**, 185, 817.

или, если отбросить одинаковые для всех принадлежащих системе величин множители $e^{2\pi\nu(n,m)t}$ (зависящие только от индексов n и m), совокупность величин

$$a(n, m). \tag{2}$$

Таким образом, можно говорить о матрице a (обычно бесконечной).

II. Операции (сложения и умножения), производимые над квантовотеоретическими величинами, определены в соответствии с правилами, которым подчиняются операции над матрицами.

III. Пусть $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, где $x_1, x_2, \dots, x_n$ — квантовотеоретические величины, — функция, заданная при помощи операций сложений и умножения матриц. Тогда можно ввести производные функции f по величинам x (например по x_1) двух родов:

а) производная первого рода определяется из соотношения

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \lim_{\alpha\to 0} \frac{f(x_1 + \alpha 1, x_2, \dots, x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\alpha}, \tag{3}$$

где α — число, а 1 — единичная матрица: $1 = (\delta_{mn})$,

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad n = m, \\ 0 & \text{при} \quad n \neq m, \end{cases}$$

б) производная второго рода (см. часть I) определяется из соотношения

$$\frac{\partial f}{\partial x_1}(n, m) = \frac{\partial D(f)}{\partial x_1(n, m)}, \tag{4}$$

где $D(f)$ — сумма диагональных элементов матрицы f.

Внешне производные первого и второго рода мы будем отличать по горизонтальной черте (жирной для производных первого рода и тонкой для производных второго рода).

В части I мы использовали только производные второго рода, поскольку они позволяют дать простую формулировку вариационного принципа квантовой механики, в силу чего введение их представляется нам вполне естественным. Тем не менее при проведении некоторых расчетов удобнее пользоваться производными первого рода. Вообще следует заметить, что введение любых производных в квантовую механику носит несколько искусственный характер и что естественным аналогом производных классической теории являются операции в левых частях соотношений (6). Для формулировки канонических уравнений важно отметить, что для функции энергии $H(p, q)$ операции дифференцирования первого и второго рода совпадают[6].

IV. Вычисления с квантовотеоретическими величинами из-за некоммутативности умножения оставались бы в известном смысле неопределенными, если бы

---

[6] Действительно, в качестве функции H в части I мы выбирали не любую функцию вида

$$H^* = \sum a_{sr} p^s q^r,$$

а симметризованную функцию

$$H = \sum a_{sr} \frac{1}{s+1} \sum_{l=0}^{s} p^{s-l} q^r p^l,$$

приводящую к тем же уравнениям Гамильтона. Для симметризованной функции H справедливы

значение выражения $pq - qp$ нельзя было задать заранее[7]. Поэтому мы вводим в качестве фундаментального квантовотеоретического соотношения равенство

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i}1. \tag{5}$$

Физическую интерпретацию этого соотношения в духе принципа соответствия мы обсудим в дальнейшем. Здесь же важно подчеркнуть, что уравнение (5) — единственное из уравнений развиваемой нами квантовой механики, в которое входит постоянная Планка h. Следует считать весьма удовлетворительным, что постоянная h входит здесь в основания нашей теории столь простым образом. Кроме того, из соотношения (5) следует, что в пределе при $h = 0$ новая теория должна переходить в классическую, как того требуют физические соображения.

Из равенства (5) можно вывести еще одно соотношение, которое понадобится нам в дальнейшем.

Пусть $f(p, q)$ — любая функция от p и q. Тогда

$$\begin{aligned} fp - qp &= \frac{\partial f}{\partial p}\frac{h}{2\pi i}, \\ pf - fp &= \frac{\partial f}{\partial q}\frac{h}{2\pi i}. \end{aligned} \tag{6}$$

Если предположить, что эти соотношения выполняются для любых двух функций φ и ψ, то они остаются в силе и для $\varphi + \psi$ и $\varphi\psi$. Для $\varphi + \psi$ наше утверждение тривиально. Проверка утверждения для $\varphi\psi$ сводится к несложным выкладкам:

$$\varphi\psi q - q\varphi\psi = \varphi(\psi q - q\psi) + (\varphi q - q\varphi)\psi = \left(\varphi\frac{\partial\psi}{\partial p} + \frac{\partial\varphi}{\partial p}\psi\right)\frac{h}{2\pi i} = \frac{\partial(\varphi\psi)}{\partial p}\frac{h}{2\pi i}$$

(для $p\varphi\psi - \varphi\psi p$ вычисления производятся аналогично).

Соотношения (6) выполняются для p и q, а следовательно, и для любой функции f, представимой в виде формального ряда по степеням p и q.

§2

Канонические уравнения, закон сохранения энергии и условие частот

Пусть заданы функции энергии $H(p, q)$ и соответствующие канонические уравнения

$$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}. \tag{7}$$

следующие формулы, вывод которых дан в части I:

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \sum a_{sr}\frac{1}{s+1}\left\{\sum_{l=0}^{s-1}(s-l)p^{s-1-l}q^r p^l + \sum_{l=0}^{s} l p^{s-l}q^r p^{l-1}\right\} = \sum a_{sr}\sum_{l=0}^{s-1} p^{s-1-l}q^r p^l = \frac{\partial H}{\partial p},$$

$$\frac{\partial H}{\partial q} = \sum a_{sr}\frac{r}{s+1}\sum_{l=0}^{s} p^{s-l}q^{r-1}p^l = \sum a_{sr}\sum_{j=0}^{r-1} q^{r-1-j}p^s q^j = \frac{\partial H}{\partial q}.$$

[7] К сожалению, в уравнениях движения эту разность приходится полагать равной некоторой диагональной матрице.

Из комбинационного принципа для

$$\nu(n,m)+\nu(m,k)=\nu(n,k) \tag{8}$$

следует, что ν можно представить в виде

$$\nu(n,m)=\frac{W_n-W_m}{h}. \tag{9}$$

Введем теперь квантовотеоретическую величину W как «величину терма», определяемую соотношениями

$$W(n,m)=\begin{cases} W_n & \text{при } n=m, \\ 0 & \text{при } n\neq m. \end{cases}$$

Нетрудно видеть, что W — диагональная матрица.

Тогда для любой квантовотеоретической величины справедливо соотношение

$$\dot{a}=\frac{2\pi i}{h}(Wa-aW). \tag{10}$$

Действительно, $\dot{a}$ по определению (см. часть I) удовлетворяет соотношению

$$\dot{a}(n,m)=2\pi i\nu(n,m)a(n,m).$$

К числу основных столпов теории, которую мы стремимся построить, относятся закон сохранения энергии ($H=\text{const}$) и условие частот ($\nu(n,m)=(H_n-H_m)/h$, $H_n=W_n+\text{const}$).

Для доказательства обоих утверждений подставим в уравнения (7) соотношения (6) и (10):

$$\begin{aligned} Wq-qW&=Hq-qH,\\ Wp-pW&=Hp-pH, \end{aligned} \tag{11}$$

или, что то же,

$$\begin{aligned} (W-H)\,q-q\,(W-H)&=0,\\ (W-H)\,p-p\,(W-H)&=0. \end{aligned}$$

Таким образом, величина $W-H$ перестановочна с p и q, а следовательно, и с любой функцией от p, q, в частности с H:

$$(W-H)H-H(W-H)=0.$$

Отсюда в силу соотношения (10) получаем:

$$\dot{H}=0. \tag{12}$$

Тем самым закон сохранения энергии доказан, H — не что иное, как диагональная матрица $H(n,m)=\delta_{nm}H_n$. Условие частот следует непосредственно из соотношений (11):

$$q\,(n,m)\,(H_n-H_m)=q\,(n,m)\,(W_n-W_m), \tag{13}$$

то есть

$$\frac{H_n-H_m}{h}=\nu(n,m). \tag{14}$$

Закон сохранения энергии и условие частот мы вывели из канонических уравнений при помощи основного соотношения (5). После того, как доказательства получены, их можно обратить. Мы знаем, что закон сохранения энергии и условие частот верны. Следовательно, если функция энергии H задана как аналитическая функция любых переменных P, Q, то всякий раз, когда

$$PQ - QP = \frac{h}{2\pi i}1,$$

выполняются канонические уравнения

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P}, \quad \dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q}. \tag{15}$$

Это следует из того, что величины $PH - HP$ и $HQ - QH$ допускают двоякую интерпретацию: при помощи соотношений (6) и соотношения (10).

§ 3
Канонические преобразования

Под каноническим преобразованием переменных p, q в новые переменные P, Q, как следует из предыдущего, мы понимаем преобразование, при котором

$$pq - qp = PQ - QP = \frac{h}{2\pi i}, \tag{16}$$

поскольку в этом случае и для P, Q, и для p, q выполняются канонические уравнения (7) и (15).

Общее преобразование, удовлетворяющее этому условию, представимо в виде

$$\begin{aligned} P &= SpS^{-1}, \\ Q &= SqS^{-1}, \end{aligned} \tag{17}$$

где S — произвольная квантовотеоретическая величина. Мы полагаем, что соотношения (17) задают *наиболее общий* вид канонического преобразования. Соотношения (17) обладают еще тем простым свойством, что для любой функции $f(P, Q)$

$$f(P, Q) = Sf(p, q)S^{-1}, \tag{18}$$

где $f(p, q)$ получается из $f(P, Q)$ при подстановке p вместо P и q вместо Q и сохранении вида исходной функции. Доказательство этого утверждения для функций в смысле нашего определения непосредственно следует из того, что оно выполняется для $p + q$ и pq.

Важность канонических преобразований основана на следующем утверждении. Если задана любая пара значений p_0, q_0, удовлетворяющая уравнениям (15), то задачу интегрирования канонических уравнений для функции энергии $H(p, q)$ можно свести к задаче: найти функцию S, такую, чтобы при

$$p = Sp_0S^{-1}, \quad q = Sq_0S^{-1} \tag{19}$$

функция

$$H(p, q) = SH(p_0, q_0)S^{-1} = W \tag{20}$$

была диагональной матрицей. Уравнение (20) — аналог уравнения Гамильтона в частных производных, S в некотором смысле соответствует функции действия.

§ 4
Теория возмущений

Пусть задана некоторая механическая задача, определяемая функцией энергии

$$H = H_0(p,q) + \lambda H_1(p,q) + \lambda^2 H_2(p,q) + \dots \; . \tag{21}$$

Предположим, что решение этой задачи нам известно. Следовательно, известны величины p_0, q_0, удовлетворяющие условию $p_0q_0 - q_0p_0 = \frac{h}{2\pi}1$ и обращающие $H_0(p_0, q_0) = W_0$ в диагональную матрицу. Попытаемся определить матрицу преобразования S так, чтобы

$$p = Sp_0S^{-1}, \quad q = Sq_0S^{-1} \tag{22}$$

и

$$H(p,q) = SH(p_0,q_0)S^{-1} = W,$$

то есть чтобы $H(p,q)$ была диагональной матрицей. Предположим, что решение представимо в виде

$$S = 1 + \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots \; . \tag{23}$$

Тогда

$$S^{-1} = 1 - \lambda S_1 + \lambda^2(S_1^2 - S_2) + \lambda^3 \dots \; . \tag{24}$$

Если функция энергии H задана разложением (21), то, расположив соотношение для $H(p,q)$ по степеням λ, получим следующие уравнения последовательных приближений:

$$\begin{aligned} H_0(p_0,q_0) &= W_0, \\ S_1H_0 - H_0S_1 + H_1 &= W_1, \\ S_2H_0 - H_0S_2 + H_0S_1^2 - S_1H_0S_1 + S_1H_1 - H_1S_1 + H_2 &= W_2, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots & \\ S_rH_0 - H_0S_r + F_r(H_0,\dots,H_r,S_0,\dots,S_{r-1}) &= W_r, \end{aligned} \tag{25}$$

где $H_0, H_1, \dots$ зависят только от аргументов p_0, q_0.

Первое уравнение (25) выполняется по предположению. Остальные необходимо решить по порядку аналогично тому, как это делается в классической теории: сначала, чтобы определить постоянную энергии, произвести усреднение, а затем сразу же выписать решение

$$\begin{aligned} W_r &= \overline{F}_r, \\ S_r(m,n) &= \frac{F_r\,(m,n)}{h\nu_0\,(m,n)}(1-\delta_{mn}), \end{aligned} \tag{26}$$

где $\nu_0(m,n)$ — частоты невозмущенного движения.

Найденное решение удовлетворяет условию

$$S\widetilde{S}^* = 1, \tag{27}$$

где волнистая черта означает замену строк столбцами (транспозицию), а звездочка — переход к комплексно-сопряженным величинам. Поскольку в дальнейшем мы еще вернемся к этому соотношению и рассмотрим его с более общих позиций, пока

ограничимся лишь тем, что констатируем для первого приближения, которое сейчас вычислим: из соотношения (27) следует, что

$$S_1 + \widetilde{S}_1^* = 0. \tag{28}$$

Значение, придаваемое соотношению (8), основано на том, что из него следует эрмитовость матриц p и q. Действительно, из (22) получаем[8]:

$$q^* = S^* q_0^* S^{*-1} = \widetilde{S}^{-1} \widetilde{q}_0 \widetilde{S} = \widetilde{q},$$

(и аналогичное равенство для p).

В первом приближении из (26), как и в классической теории, получаем:

$$W_1 = \overline{H}_1, \tag{29}$$

откуда

$$S_1(m,n) = \frac{H_1(m,n)}{h\nu_0(m,n)}(1 - \delta_{mn}). \tag{30}$$

Это выражение действительно удовлетворяет условию (28) вследствие предположения о том, что H_1 — эрмитова форма. Вычислив затем энергию во втором приближении, получим

$$W_2 = \overline{H}_2 + \frac{1}{h} \sum_l{}' \frac{H_1(n,l) H_1(l,n)}{\nu_0(n,l)}, \tag{31}$$

где штрих у знака суммы означает, что члены с нулевым знаменателем ($l = n$) опущены.

Продолжая этот процесс, можно последовательно вычислить все члены рядов W и S. Подставив в (22) ряд для S, получим разложения

$$q = q_0 + \lambda q_1 + \lambda^2 q_2 + \ldots,$$
$$p = p_0 + \lambda p_1 + \lambda^2 p_2 + \ldots$$

с известными коэффициентами. Например, коэффициенты первого приближения имеют вид

$$q_1 = S_1 q_0 - q_0 S_1,$$
$$p_1 = S_1 P_0 - p_0 S_1,$$

или подробно:

$$\begin{aligned} q_1(m,n) &= \frac{1}{h} \sum_k{}' \left(\frac{H_1(m,n)\, q_0(k,n)}{\nu_0(m,k)} - \frac{q_0(m,k)\, H_1(k,n)}{\nu_0\,(k,n)} \right), \\ p_1(m,n) &= \frac{1}{h} \sum_k{}' \left(\frac{H_1(m,n)\, q_0(k,n)}{\nu_0(m,k)} - \frac{q_0(m,k)\, H_1(k,n)}{\nu_0\,(k,n)} \right). \end{aligned} \tag{32}$$

Формулы (32) — не что иное, как дисперсионные соотношения Крамерса[9] в предельном случае бесконечно малой частоты внешнего поля. Возможность вывода

[8] Напомним, что $\widetilde{ab} = \widetilde{b}\widetilde{a}$.

[9] *Kramers H.A.* Nature, 1924, **113**, 673; 1924, **114**, 310. См. также *Ladenburg R.* Zs. Phys., 1921, **4**, 451; *Ladenburg R., Reiche F.* Naturwiss., 1923, **1**, 584.

формул, ранее полученных на основе соображений, связанных с принципом соответствия, представляется нам важным аргументом в пользу развиваемой нами теории. Соотношение (31) было получено Борном[10] при помощи реинтерпретации соответствующих классических формул. Член с $m = n$ в соотношении (32) отвечает формуле Крамерса для обычной дисперсии света, а другие члены (с $m \neq n$) — формулам Крамерса и Гейзенберга[11] для рассеянного света с комбинационными частотами. Последними выражениями Паули[12] воспользовался при вычислениях интенсивностей переходов в спектре ртути, происходящих во внешнем электрическом поле (и запрещенных в отсутствие поля). Для вывода общих дисперсионных формул (при ненулевой частоте внешнего поля) необходимы общие соображения о действии внешних сил, изменяющихся со временем, к рассмотрению которых мы сейчас перейдем.

§5

Системы, в которых функция энергии явно зависит от времени

Рассмотрение квантовомеханического действия сил, явно зависящих от времени, представляет особый интерес потому, что эта проблема позволяет выявить некоторые различия между квантовотеоретической и классической механикой. Задачу о действии изменяющихся во времени внешних сил надлежит рассматривать как предельный случай задачи о взаимодействии двух систем, в которой влияние взаимодействия на одну систему (обозначим ее A) столь мало, что на воздействии ее на другую систему (обозначим ее B) это взаимодействие не сказывается. Итак, рассмотрим связь двух систем с точки зрения квантовой механики. Функция Гамильтона распадается на три части H_A, lH_B и $\varepsilon\lambda H_{AB}$ (λ — пока произвольный параметр, ε — малая величина). Предположим, что система A известна. Для вычисления движений системы B в классической теории достаточно составить для координат B уравнения движения (по функции Гамильтона $(H_B + \varepsilon H_{AB})$), а в качестве координат системы A взять решения уравнений движения как функции времени (при определенных значениях постоянных, соответствующих системе A). При этом, поскольку мы пренебрегаем обратным действием системы на систему B, из всех постоянных системы A в возмущенную задачу для B в качестве новой переменной входит только время. В квантовой механике все обстоит так же, как и в классической, если ограничиться первым порядком возмущений (то есть членами в разложениях координат, импульсов и других величин, характеризующих систему B, пропорциональными ε). При переходе к более высоким порядкам возмущений ситуация изменяется. Дело в том, что при вычислении высоких порядков возмущений возникают произведения величин, из которых более чем одна неявно содержит координаты системы A. По квантовомеханическим правилам образования произведений это означает, что знать «внешние силы как функции времени» *при определенных значениях постоянных* в системе A уже недостаточно: внешние силы должны быть известны *при всех значениях постоянных*. Тем самым понятие внешние силы как бы утрачивают смысл. Разрешение возникшего затруднения мы усматриваем в следующем замечании. Обратное действие само порождает члены порядка $\lambda\varepsilon^2$ в разложениях координат системы B, поэтому пренебрежение обратным действием системы A на систему B и одновременное вычисление членов с ε^2 в системе B имеет смысл лишь в том случае, если параметр λ можно считать малым. Физически это означает, что изменение координат, импульсов и т. п. системы A на величину

---

[10] *Born M.* Zs. Phys., 1924, **26**, 379.

[11] *Kramers H. A., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **31**, 681.

[12] *Pauli W.* Danske Vidensk. Selsk., Math.-fys. Medd., 1925, **7**, 3.

порядка соответствующих параметров системы B не вносит сколько-нибудь заметных изменений в действие системы A на систему B. В этом приближении мы можем составлять квантовомеханические произведения и, следовательно, вычислять старшие порядки возмущений по ε, при этом правила образования произведений сводятся просто к правилам классического умножения, поскольку входящие в H_{AB} координаты, амплитуды и частоты в рассматриваемом приближении не зависят от постоянных системы A. В этом смысле действие на атом сильного электромагнитного переменного поля можно было бы вычислить как действие «внешней силы» в пренебрежении обратным действием, поскольку энергию поля можно считать бесконечной по сравнению с энергией атома. Действие α-частицы на электроны атома вследствие относительно большой энергии α-частицы так же можно было бы, как и классической теории, рассматривать как «внешнюю силу» и разложение силы, действующей на электроны, в ряд Фурье по времени в этом приближении совпадало бы с классическим. Однако действие отдельного атома на какой-нибудь другой атом невозможно интерпретировать как действие внешних сил (подобное истолкование допустимо лишь в членах первого порядка), поскольку в членах высокого порядка пренебрежение обратным действием привело бы к неверным результатам.

Подведем итог нашим рассуждениям. При определенных предположениях в квантовой теории, как и в классической, имеет смысл говорить о действии на атом некоторых сил, изменяющихся со временем. В этом случае для вычислений величин, явно зависящих от времени, остаются в силе правила вычислений классической теории. Например, пусть поле внешних сил периодично по времени с периодом ν_0. Тогда общий член координаты q имеет вид

$$q(n,m) = e^{2\pi i[\nu(m,n)+\tau\nu_0]t}, \tag{33}$$

общий член q^2 —

$$\sum_{k,\tau'} q(m,k,\tau-\tau')\,q(k,n,\tau')\,e^{2\pi i[\nu(m,n)+\tau\nu_0]t}. \tag{34}$$

Именно поэтому зависящие от времени внешние силы мы считаем замечательным примером перехода квантовотеоретической кинематики в классическую в духе принципа соответствия.

Если интерес представляет только вычисление возмущений первого порядка, вносимых внешним полем, то получаемые при последующих расчетах результаты остаются в силе, даже если исходные допущения не выполняются (полная аналогия с классической теорией).

Как следует из приведенных выше соображений, математический анализ системы (удовлетворяющей принятым предположениям) с явной зависимостью от времени можно провести просто по аналогии с соответствующими классическими методами. Предположим снова, что внешняя сила периодична по времени с периодом ν_0. Пусть

$$H = H(p_k, q_k, \cos 2\pi\nu_0 t) \tag{35}$$

— функция Гамильтона[13]. Введем новую степень свободы с переменными q', p' и в качестве функции Гамильтона новой задачи, не содержащей более явной зависимости от времени, выберем следующую:

$$H' = H(p_k, q_k; q') + 2\pi\nu_0\sqrt{1-q'^2}\,p'. \tag{36}$$

[13] Мы временно используем здесь результаты следующей главы по системам со многими степенями свободы.

Канонические уравнения для p_k, q_k остаются при этом прежними, лишь вместо $\cos 2\pi\nu_0 t$ всюду входит q'. Канонические уравнения для новых переменных имеют вид:

$$\begin{aligned} \dot{q}' &= \frac{\partial H'}{\partial p'} = 2\pi\nu_0\sqrt{1-q'^2}, \\ \dot{p}' &= -\frac{\partial H'}{\partial p'} = -\frac{\partial H}{\partial q'} + 2\pi\nu_0\frac{q'}{\sqrt{1-q'^2}}p'. \end{aligned} \tag{37}$$

Первое уравнение означает, что переменная q' действительно равна $\cos 2\pi\nu_0 t$ (с точностью до произвольного выбора начала отсчета времени), в силу чего канонические уравнения для p_k, q_k имеют такой же вид, как и до введения новой степени свободы. Второе уравнение (37) позволяет определить p'. Таким образом, соотношение (36) позволяет свести задачу с функцией Гамильтона (35) к обычно рассматриваемому случаю.

Нас интересует прежде всего вопрос о том, какие изменения необходимо внести в формулы возмущений (25), если явная зависимость от времени входит в $H_1, H_2, \ldots$, но не в H_0. Как показывают несложные рассуждения, формулы возмущений в этом случае получаются из приведенных выше при замене выражения $H_0S_r - S_rH_0$ (всюду, где оно встречается) выражением $H_0S_r - S_rH_0 + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S_r}{\partial t}$ (H_0 входит только в такие комбинации). Следовательно, в низших порядках новые формулы возмущений имеют вид:

$$\begin{aligned} H_0(p_0, q_0) &= W_0, \\ S_1H_0 - H_0S_1 - \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S_1}{\partial t} + H_1 &= W_1, \\ S_2H_0 - H_0S_2 - \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S_2}{\partial t} + (H_0S_1 - S_1H_0 + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S_1}{\partial t})S_1 + S_1H_1 - H_1S_1 + H_2 &= W_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \tag{38}$$

Мы будем предполагать, что формулы (38) остаются в силе, даже если не выполняется предположение о том, что внешние силы периодичны по времени, хотя при выводе формул было использовано именно это предположение.

Уравнения первого порядка в формулах (38), выполняющиеся и в том случае, когда предположения о «внешних силах» становятся неверными, вместе с соотношениями (22):

$$\begin{aligned} q &= q_0 + \lambda(S_1q_0 - q_0S_1), \\ p &= p_0 + \lambda(S_1p_0 - p_0S_1), \end{aligned}$$

позволяют ответить на вопросы теории дисперсионных соотношений. Действительно, если положить

$$H_1 = Eeq_0\cos 2\pi\nu_0 t,$$

то

$$\begin{aligned} H_1(m,n;1) &= \frac{Ee}{2}q_0(m,n), & H_1(m,n;-1) &= \frac{Ee}{2}q_0(m,n), \\ S_1(m,n;1) &= \frac{Ee}{2h}\frac{q_0(m,n)}{\nu_0(m,n)+\nu_0}, & S_1(m,n;-1) &= \frac{Ee}{2h}\frac{q_0(m,n)}{\nu_0(m,n)-\nu_0}. \end{aligned} \tag{39}$$

Отсюда следует (см. также соотношение (22)), что

$$q_1(m,n;+1) = \frac{Ee}{2h}\sum_k \left(\frac{q_0(m,k)\,q_0(k,n)}{\nu_0(m,k)+\nu_0} - \frac{q_0(m,k)\,q_0(k,n)}{\nu_0(k,n)+\nu_0}\right). \qquad (40)$$

Если к тому же предположить, что мы имеем дело с декартовыми координатами (то есть, что $p = m\dot{q}$), то

$$q_1(m,n;1) = \frac{Ee}{2h2\pi i m}\sum_k \frac{q_0(m,k)\,p_0(k,n) - p_0(m,k)\,q_0(k,n)}{(\nu_0\,(m,k)+\nu_0)(\nu_0\,(k,n)+\nu_0)} \qquad (41)$$

и

$$q_1(m,n;-1) = \frac{Ee}{2h2\pi i m}\sum_k \frac{q_0(m,k)p_0(k,n) - p_0(m,k)q_0(k,n)}{(\nu_0(m,k)-\nu_0)(\nu_0(k,n)-\nu_0)}. \qquad (42)$$

Соотношения (40)–(42) совпадают с формулами теории дисперсии Крамерса[14]. Особый интерес представляет случай, когда частота падающего света очень велика ($|\nu_0| \gg |\nu_0(m,k)|$ и $|\nu_0| \gg |\nu_0(n,k)|$): в первом приближении мы получаем

$$q_1 = -\frac{Ee}{h2\pi i\nu_0^2 m}(p_0q_0 - q_0p_0)\cos 2\pi\nu_0 t,$$

или с учетом соотношения (5)

$$q_1 = \frac{Ee}{4\pi^2 m\nu_0^2}\cos 2\pi\nu_0 t.$$

Этот результат означает следующее: квантовомеханическое перестановочное соотношение (5) в конечном счете приводит к тому, что при достаточно большой частоте электрон при рассеянии ведет себя как свободный электрон. Рассеянный свет с частотами $\nu_0(m,n)+\nu_0$ $(m \neq n)$ гаснет, а рассеянный свет с частотой ν_0 имеет такую же интенсивность, как при рассеянии на свободном электроне[15].

Глава 2

ОСНОВЫ ТЕОРИИ СИСТЕМ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЧИСЛОМ СТЕПЕНЕЙ СВОБОДЫ

§ 1

Канонические уравнения движения, теория возмущений для невырожденных систем

При $f > 1$ степеней свободы естественно представлять квантовотеоретические величины не двумерными, а $2f$-мерными матрицами, что соответствует $2f$-мерному многообразию стационарных состояний в классическом J-пространстве:

$$q_k = (q_k(n_1,\ldots,n_f,m_1,\ldots,m_f)),$$
$$p_k = (p_k(n_1,\ldots,n_f,m_1,\ldots,m_f)). \qquad (1)$$

[14] Случай ν_0 рассмотрен на с. 135.

[15] *Kuhn W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 408; *Thomas W.* Naturwiss., 1925, **13**, 627; *Reiche F., Thomas W.* Zs. Phys., 1925, **34**, 510.

Однако это представление, хотя оно при определенных обстоятельствах весьма удобно и наглядно, отнюдь не обязательно. Основные динамические уравнения и в случае нескольких степеней свободы имеют форму *матричных уравнений*, но матрицы могут оставаться двумерными, как и прежде. Выяснилось, что даже в случае одной степени свободы *последовательность* стационарных состояний, отражающаяся в порядке, в котором располагаются строки матриц, в отличие от существовавшей ранее теории совершенно произвольна и не связана ни с каким внутренним свойством системы. Это же замечание целиком переносится и на многомерные матрицы, их можно подвергать произвольным преобразованиям, в частности превращать $2f$-мерные матрицы в двумерные. Действительно, определения операций сложения, умножения и дифференцирования по времени совершенно независимы от *соотношений между числами* $n_1, n_2, \ldots, n_f$, которые, если их брать *по одному, характеризуют состояния*, а если их брать *по два, то переходы*.

Ясно также, что общие правила матричного исчисления, изложенные в главе 1 части I и в главе 1 настоящей работы, без каких либо изменений применимы и в теории систем с несколькими степенями свободы. Непосредственно переносится на случай нескольких степеней свободы вывод уравнения из вариационного принципа из главы 1 части 1, что позволяет записать уравнения

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}. \tag{2}$$

Существенно новыми, выходящими за рамки теории систем с одной степенью свободы соотношениями являются перестановочные отношения p_k и q_k, возникающие в случае нескольких степеней свободы. Если бы эти перестановочные отношения не были известны, то, как и в системах с одной степенью свободы, вычисления квантовотеоретических величин приводило бы к неопределенному в некотором смысле результату.

Соотношения

$$\begin{aligned} p_k q_l - q_l p_k &= \frac{h}{2\pi i}\delta_{kl}, \\ p_k p_l - p_l p_k &= 0, \\ q_k q_l - q_l q_k &= 0 \end{aligned} \tag{3}$$

представляют собой очевидное обобщение соотношений (5) (гл. 1). Если H — (симметризованная) функция энергии, то эти соотношения позволяют заменить уравнения (2) уравнениями

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}. \tag{2'}$$

Кроме того, из соотношений (3) [16] так же, как и в главе 1 настоящей работы, следует, что

$$\begin{aligned} p_k f(q_1, \ldots, q_f, p_1, \ldots, p_f) - f p_k &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial f}{\partial q_k}, \\ f q_k - q_k f &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial f}{\partial p_k}. \end{aligned} \tag{4}$$

Доказательство закона сохранения энергии и условия частот проводится на основе уравнений (2) и соотношений (4) так же, как в главе 1. Соотношения (3) и (4)

[16] Физический смысл этих соотношений в дисперсионной теории был рассмотрен Г. А. Крамерсом (*Kramers H. A.* Physica, 1925 (Dez.)).

позволяют также доказать, что канонические уравнения движения (2) выполняются всегда, даже если для некоторой системы P_k, Q_k удовлетворяют соотношениям (3).

Таким образом, преобразование переменных p_k, q_k в новые переменные P_k, Q_k, если оно сохраняет соотношения (3), можно считать каноническими.

Весьма общий класс таких преобразований задается формулами

$$\begin{aligned} P_k &= Sp_kS^{-1}, \\ Q_k &= Sq_kS^{-1}. \end{aligned} \tag{5}$$

Это преобразование также обладает свойством переводить любую функцию $f(P, Q)$ в

$$f(P_1, \ldots, P_f, Q_1, \ldots, Q_f) = Sf(p_1, \ldots, p_f, q_1, \ldots, q_f)S^{-1}. \tag{6}$$

Если известна система $p_1^0, \ldots, p_f^0, q_1^0, \ldots, q_f^0$, удовлетворяющая соотношениям (3), то интегрирование уравнений (2) сводится к задаче об отыскании функции S, удовлетворяющей соотношениям

$$\begin{aligned} p_k &= Sp_k^0S^{-1}, \\ q_k &= Sq_k^0S^{-1} \end{aligned} \tag{5a}$$

и переводящей

$$H(p, q) = SH(p^0, q^0)S^{-1} = W \tag{7}$$

в диагональную матрицу.

Уравнение (7) представляет собой аналог дифференциального уравнения в частных производных Гамильтона.

Соотношения (3) и уравнения (2) накладывали бы на p_k, q_k слишком много ограничений, если бы они были *независимыми*. Вывод соотношений (3) из минимального числа независимых и непротиворечивых предложений представлял бы интересную математическую задачу, однако мы не будем останавливаться на ней. Заметим лишь, что равенство

$$\frac{d}{dt}\sum_k (p_kq_k - q_kp_k) = 0$$

должно в общем случае следовать из уравнений движения (1). Наоборот, можно доказать, что соотношение (3) вместе с уравнениями движения (2) или эквивалентным требованием (7) *выполняются всегда* (разумеется, за исключением особых случаев).

Доказательство этого утверждения следует проводить в связи с обобщением теории возмущения из главы 1, § 4 на случай произвольного числа степеней свободы. Предположим, что функция энергии $H(p, q)$ представима в виде

$$H = H_0(p, q) + \lambda H_1(p, q) + \lambda^2 H_2(p, q) + \ldots, \tag{8}$$

так что

$$H_0(p, q) = \sum_{k=1}^{f} H^{(k)}(p_k, q_k). \tag{9}$$

Тогда при $\lambda = 0$ мы получаем f *несвязанных* систем с одной степенью свободы. Решениями f задач с

$$H = H^{(k)}(p_k, q_k)$$

служат

$$q_k = \overset{0}{q}_k, \quad p_k = \overset{0}{p}_k,$$

где $\overset{0}{q}_k$, $\overset{0}{p}_k$ — *двумерные* матрицы

$$\overset{0}{q}_k = \big(\overset{0}{q}_k(n, m)\big), \quad \overset{0}{p}_k = \big(\overset{0}{p}_k(n, m)\big). \tag{10}$$

Если эти f несвязанных систем формально рассматривать как единую систему с f степенями свободы, то $\overset{0}{q}_k$, $\overset{0}{p}_k$ являются $2f$-мерными матрицами

$$\begin{aligned} \overset{0}{q}_k &= \big(\overset{0}{q}_k(n_1, \ldots, n_f; m_1, \ldots, m_f)\big), \\ \overset{0}{p}_k &= \big(\overset{0}{p}_k(n_1, \ldots, n_f; m_1, \ldots, m_f)\big), \end{aligned} \tag{11}$$

удовлетворяющими соотношениям

$$\begin{aligned} \overset{0}{q}_k &= \big(\overset{0}{q}_k\,(n_1, \ldots, n_f; m_1, \ldots, m_f)\big) = \delta_k \overset{0}{q}_k\,(n_k, m_k), \\ \overset{0}{p}_k &= \big(\overset{0}{p}_k\,(n_1, \ldots, n_f; m_1, \ldots, m_f)\big) = \delta_k \overset{0}{p}_k\,(n_k, m_k), \end{aligned}$$

где $\delta_k = 1$ при $n_j = m_j$ для всех j, кроме $j = k$, $\delta_k = 0$ (в последнем случае при любом $j \neq k$ равенство $n_j = m_j$ не выполняется). Отсюда следует два вывода. Во-первых, соотношения

$$\overset{0}{p}_k \overset{0}{q}_k - \overset{0}{q}_k \overset{0}{p}_k = \frac{h}{2\pi i} 1, \tag{12}$$

выполнявшиеся первоначально для *двумерных* матриц (10), остаются в силе для $2f$*-мерных* матриц (11). Во-вторых, появляются соотношения

$$\begin{aligned} &\overset{0}{p}_k \overset{0}{q}_l - \overset{0}{q}_l \overset{0}{p}_k = 0 \quad \text{при} \quad l \neq k, \\ &\overset{0}{p}_k \overset{0}{p}_l - \overset{0}{p}_l \overset{0}{p}_k = \overset{0}{q}_k \overset{0}{q}_l - \overset{0}{q}_l \overset{0}{q}_k = 0. \end{aligned} \tag{13}$$

При $\lambda = 0$ мы действительно получаем соотношения (13). Требуется доказать, что p, q можно определить таким способом, при котором в более высоких приближениях соотношения (3) выполняются одновременно с уравнением $H = W$. При этом, как и прежде, предполагается, что система H_0 *невырождена*, т. е. при подстановке $q = q^0$, $p = p^0$ среди диагональных членов H_0 не найдется двух равных. В этом случае мы можем воспользоваться формулой (5а), чтобы получить

$$q_k = S\, \overset{0}{q}_k\, S^{-1}, \quad p_k = S\, \overset{0}{p}_k\, S^{-1} \tag{14}$$

и определить

$$S = 1 + \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \ldots$$

так, чтобы выполнялось уравнение $H = W$, при этом все соотношения (3) также будут выполнены, поскольку при подстановке (14) они переходят в (12) и (13). На этом доказательство завершается.

Соотношения (3) инвариантны относительно линейного ортогонального преобразования q_k и p_k. Действительно, если

$$q'_k = \sum_l a_{kl}\, q_l, \qquad p'_k = \sum_l a_{kl}\, p_l, \qquad \sum a_{kl}\, a_{jl} = \delta_{kj},$$

то

$$p'_k\, q'_l - q'_l\, p'_k = \sum_{h,j} a_{kh}\, a_{lj}\, (p_h\, q_j - q_j\, p_h) = \delta_{kl}\frac{h}{2\pi i}$$

(остальные соотношения преобразуются аналогично). Следовательно, если соотношения (3) выполняются в одной системе декартовых координат, то они выполняются и в любой другой системе декартовых координат.

Добавим также, что соотношение (3) позволяют перенести в новую теорию одну хорошо известную теорему классической механики. Пусть

$$H = E_{\text{кин}} + E_{\text{пот}} = \frac{1}{2}\sum_k \frac{p_k^2}{m_k} + E_{\text{пот}} \tag{15}$$

и $E_{\text{пот}}$ — однородная функция координат степени m. Тогда из соотношений (3) получаем:

$$E_{\text{пот}} = \frac{1}{n}\sum_k \frac{\partial E_{\text{пот}}}{\partial q_k} q_k \tag{16}$$

и

$$\frac{d}{dt}\sum_k p_k q_k = \sum_k (\dot{p}_k q_k + p_k \dot{q}_k) = 2E_{\text{кин}} - nE_{\text{пот}},$$

в силу чего для *средних значений* выполняется соотношение

$$\bar{\bar{E}}_{\text{пот}} = \frac{n}{2}\bar{\bar{E}}_{\text{пот}}. \tag{17}$$

Например, при $n = 2$ (гармонические колебания) $\bar{\bar{E}}_{\text{пот}} = E_{\text{пот}}$, а при $n = -1$ (кулоновские силы) $\bar{\bar{E}}_{\text{пот}} = -\frac{1}{2}\bar{\bar{E}}_{\text{пот}}$.

§ 2
Вырожденные системы

Рассмотрим теперь вырожденные системы. Если некоторые частоты $\nu(n, m)$ могут обращаться в нуль (для простоты условимся считать матрицы двумерными), то *закон сохранения энергии* $\dot{H} = 0$, как показывают соображения, развитые в части I и в настоящей работе, следует из уравнений движения и перестановочных соотношений (3). Однако $\dot{H} = 0$ отнюдь не обязательно означает, что H — диагональная матрица в силу чего доказательство условия частот утрачивает силу. Таким образом, для вырожденных систем одних лишь уравнений движения и перестановочных соотношений (3) *недостаточно* для однозначного определения свойств системы, основные уравнения нуждаются в *уточнении.* Предположим, что это уточнение формулируется следующим образом: *в качестве основных уравнений следует выбирать перестановочные соотношения и уравнение*

$$H = W = \text{диагональная матрица.} \tag{18}$$

Ясно, что это требование обеспечивает выполнение условия частот и для вырожденных систем. Весьма вероятно, что при этом (за исключением особых случаев) энергия W всегда однозначно определена. Наоборот, координаты q_k заданы не однозначно: если p_k, q_k — решение уравнения $H(p,q) = W$, то, положив

$$\begin{aligned} p' &= SpS^{-1}, \\ q' &= SqS^{-1}, \end{aligned} \tag{19}$$

мы получим новое решение. При этом

$$H(p',q') = W' = SWS^{-1}$$

и из условия $W' = W$ следует, что $WS - SW = \dot{S}\frac{h}{2\pi i} = 0$, откуда

$$S = \text{const.} \tag{20}$$

Выясним сначала, что означает полученный результат в случае невырожденных систем. Из равенств (20) мы заключаем, что S — диагональная матрица, и равенства (19) сводятся к равенствам

$$\begin{aligned} p'(n,m) &= p(n,m)\, S_n\, S_m^{-1}, \\ q'(n,m) &= q(n,m)\, S_n\, S_m^{-1}, \end{aligned} \tag{19$'$}$$

где для краткости мы вместо $S(n,n)$ ввели обозначение S_n.

Неоднозначность решения, выражаемую соотношениями (19), можно существенно уменьшить, если потребовать, чтобы и новое решение p', q' было движением, представляемым «вещественными» эрмитовыми матрицами, то есть чтобы выполнялись условия

$$|S_nS_m^{-1}| = |S_mS_n^{-1}|,$$

или

$$|S_n| = |S_m|. \tag{21}$$

Таким образом, неоднозначность решения означает произвол в выборе *фазовых множителей*, и мы получаем общее доказательство гипотезы, высказанной еще в части I относительно того, что в каждой задаче для любого состояния n фаза φ_n остается неопределенной. Из соотношений (19) видно, каким образом эти фазы входят в элементы матриц p, q. В части I предполагалось, что помимо описанного выше произвола в выборе фаз в случае невырожденных систем никакой неопределенности более ожидать не следует. Теперь же мы можем при проведении расчетов по теории возмущений, описанных в главе 1, § 4, добавлять к «периодическим» матрицам S_n постоянную матрицу. Разумеется, это отнюдь не означает, что в каждом приближении появляется новая неопределенная фаза. Нетрудно видеть, что такая свобода не позволяет получить более общее решение p, q, поскольку p^0, q^0 заранее выбраны с неопределенными фазами.

Если мы перейдем к вырожденным системам, то из равенства (20) уже не следует, что S — диагональная матрица, и соотношения (19) позволяют получать решение p', q', существенно отличающееся от решения p, q. Нам кажется, что эта неоднозначность лежит в природе вещей. По-видимому, вырожденные системы обладают некоторой *неустойчивостью*, приводящей к тому, что сколь угодно малые возмущения могут приводить к конечным изменениям координат. Математически

эта неустойчивость проявляется в том, что при полном отсутствии возмущений решения динамических уравнений остаются частично неопределенными. Разумеется, для каждого отдельного атома координаты, определяющие физические свойства системы, в частности вероятности переходов, всегда однозначно определены внешними возмущениями или предысторией системы.

Рассмотрим теперь влияние произвольных возмущений на вырожденную систему. Пусть

$$H(p,q) = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \ldots \tag{22}$$

и p^0, q^0 — произвольно выбранное, но фиксированное решение невозмущенной задачи

$$H_0(p_0, q_0) = W_0. \tag{23}$$

Подставляя

$$p = Sp^0S^{-1},$$
$$q = Sq^0S^{-1},$$

где

$$S = S_0\big(1 + \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \ldots\big), \tag{24}$$

$$S^{-1} = \big(1 - \lambda(S_1 + \lambda^2 S_2 + \ldots) + \lambda^2 \ldots\big)S_0^{-1}, \tag{25}$$

получаем (аргументы p_0, q_0 в $H_0, H_1, \ldots$ для краткости мы опускаем):

$$S_0H_0S_0^{-1} = W_0, \tag{26}$$

$$S_0S_1H_0S_0^{-1} - S_0H_0S_1S_0^{-1} + S_0H_1S_0^{-1} = W_1, \tag{27}$$

$$S_0S_2H_0S_0^{-1} - S_0H_0S_2S_0^{-1} + S_0F_2(H_0, H_1, H_2; S_1)S_0^{-1} = W_2, \tag{28}$$

....

$$S_0S_rH_0S_0^{-1} - S_0H_0S_rS_0^{-1} + S_0F_r(H_0, H_1, \ldots, H_r, S_1, \ldots S_{r-1})S_0^{-1} = W_r. \tag{29}$$

По виду эти соотношения почти совпадают с уравнениями (26). Единственное различие состоит в том, что все члены, стоящие в левых частях соотношений (26)–(29), слева умножены на S_0, а справа — на S_0^{-1}.

Об уравнении (26) мы уже упоминали. Матрица $S_0(m,n)$ становится нулевой лишь в том случае, если $\nu_0(n,m)$ обращается в нуль. Произвол, который остается в S_0, следует использовать для того, чтобы сделать разрешимым следующее уравнение. Разумеется, трудно рассчитывать, что любое решение невозмущенной задачи $H = H_0$ и в частности выбранное решение p^0, q^0 в пределе при $\lambda = 0$ даст решение p, q возмущенной задачи (22). Функция S_0 служит для того, чтобы из p^0, q^0 можно было построить решение вырожденной задачи, обладающее требуемым свойством.

Уравнение (27) преобразуется к виду

$$S_1H_0 - H_0S_1 + H_1 = S_0^{-1}W_1S_0. \tag{30}$$

Уравнение (30) разрешимо, если функцию S_0 выбрать так, чтобы выполнялось соотношение

$$\overline{H}_1 = S_0^{-1}W_1S_0 \tag{31}$$

с *диагональной матрицей* W_1. Ясно, что какие-либо общие рекомендации относительно того, каким образом можно было бы одновременно удовлетворить уравнению (31)

и требованиям, налагаемым уравнением (26), были бы столь же малоэффективны, как и общие рекомендации относительно определения вековых возмущений в классической теории. Позднее мы разовьем новый, алгебраический метод, позволяющий весьма просто рассматривать широкий класс вырождений (в главе 3).

Если выполняется соотношение (31), то уравнение (30) можно решать так же, как в главе 1. Те члены $S_1(n,m)$ функции S_1, которые соответствуют нулевым $\nu_0(n,m)$, остаются произвольными, и этой неопределенностью следует воспользоваться для того, чтобы выполнить необходимое условие разрешимости

$$\overline{F_2(H_0, H_1, H_2; S_1)} = S_0^{-1} W_2 S_0 \tag{31'}$$

с диагональной матрицей W_2 уравнения следующего приближения, которое можно преобразовать к виду

$$S_2 H_0 - H_0 S_2 + F_2 = S_0^{-1} W_2 S_0. \tag{32}$$

Трудность заключается в том, что в каждом приближении уравнениям должны удовлетворять матрицы, в значительной мере определенные, поэтому каждый раз необходимо проверять, разрешимы ли интересующие нас уравнения. Впрочем, аналогичная трудность возникает, как известно, и в классической теории. Указанные трудности удается устранить по крайней мере в высших приближениях, если система в любом приближении невырождена.

Например, пусть в разложениях

$$q = q^0 + \lambda q^{(1)} + \ldots,$$
$$p = p^0 + \lambda p^{(1)} + \ldots$$

члены $p^{(1)}$, $q^{(1)}$ полностью определены, в силу чего при

$$Q = q^0 + \lambda q^{(1)},$$
$$P = p^0 + \lambda p^{(1)},$$

выполняется соотношение

$$H(P,Q) = W_0 + \lambda W_1 + \lambda^2 H_2' + \lambda H_3' + \ldots,$$

и пусть

$$\nu_0(n,m) + \lambda \nu_1(n,m) \neq 0 \quad \text{при} \quad n \neq m.$$

Если выражение $W_0 + \lambda W_1$ обозначить для краткости через H_0' и положить

$$p = SPS^{-1},$$
$$q = SQS^{-1},$$

то должно выполняться соотношение

$$S(H_0' + \lambda^2 H_2' + \lambda^3 H_3' + \ldots) S^{-1} = W.$$

По методу, изложенному в главе 1, достичь это можно вводя разложение

$$S = 1 + \lambda^2 S_2 + \lambda^3 S_3 + \ldots.$$

Обобщение приведенных выше соображений на случай, когда лишь в r-м приближении возникает невырожденная система $W = W_0 + \lambda W_1 + \ldots + \lambda^r W_r$, очевидно[17].

В заключение мы хотели бы отметить, что известные трудности со сходимостью рядов классической теории возмущений, играющие столь важную роль в проблеме трех тел, не возникают в квантовомеханической теории возмущений. Более того, в квантовой теории орбиты, целиком лежащие в конечной части пространства, в общем случае должны быть периодическими.

Глава 3

СВЯЗЬ С ТЕОРИЕЙ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭРМИТОВЫХ ФОРМ

§ 1

Общий метод

Решение основных квантовотеоретических уравнений излагается ниже в как можно более тесной связи с классической теорией. Используемый нами формализм теории возмущений имеет весьма простую чисто алгебраическую подоплеку, заслуживающую того, чтобы извлечь ее. Это позволит не только достичь более глубокого понимания математической структуры теории, но и воспользоваться методами и результатами, полученными в математике. Например, мы построим новое определение постоянных энергии («термов»), которое остается в силе и для апериодических движений, т. е. для непрерывно изменяющихся индексов. В связи с этим появляется надежда на то, что удастся разработать прямые методы вычислений энергий, не требующие явного решения уравнений движения и соответствующие методу Зоммерфельда комплексного интегрирования в ранее существовавшей теории. Такой подход позволит нам полностью исследовать возмущения широкого класса вырожденных систем, не поддававшегося изучению перечисленными выше прежними методами теории возмущений.

Если задача с f степенями свободы задана функцией энергии $H(p, q)$, то систему матриц p_k^0, q_k^0 всегда можно выбрать так, чтобы они по крайней мере удовлетворяли перестановочным соотношениям (3) (гл. 2). Например, в качестве p_k^0, q_k^0 можно выбрать p_k, q_k системы несвязанных гармонических осцилляторов.

Тогда, как уже упоминалось (глава 2, § 1), динамическую задачу, т. е. задачу об определении p_k, q_k, можно сформулировать следующим образом:

требуется найти преобразование $(p_k^0, q_k^0) \to (p_k, q_k)$, *оставляющее инвариантным перестановочные соотношения* (3) (гл. 2) *и одновременно переводящие энергию в диагональную матрицу.*

Преобразование матриц удобнее всего рассматривать, если матрицы считать образованными наборами коэффициентов линейных преобразований или билинейных форм. Напомним некоторые известные теоремы из алгебры билинейных форм.

Каждой матрице $a = (a(n, m))$ соответствует *билинейная форма*

$$A(x, y) = \sum_{n,m} a(n, m) x_n y_m \tag{1}$$

[17] Аналогичные случаи в классической механике были рассмотрены Борном и Гейзенбергом (*Born M., Heisenberg W.* Ann. Phys., 1924, 74, 1).

от двух наборов переменных $x_1, x_2, \ldots$ и $y_1, y_2, \ldots$. Если матрица $\boldsymbol{a}$ *эрмитова*, т. е. если транспонированная матрица $\tilde{a} = (a(m,n))$ совпадает с комплексно-сопряженной исходной матрицей:

$$\tilde{a} = a^*, \quad a(m,n) = a^*(n,m), \tag{2}$$

то форма A принимает вещественные значения в том случае, когда переменные y_n заменены комплексно-сопряженными значениями переменных x_n:

$$A(x, x^*) = \sum_{n,m} a(n,m)\, x_n x_m^*. \tag{1a}$$

Напомним также легко доказываемое правило действия над эрмитовыми матрицами:

$$(\widetilde{ab}) = \tilde{b}\tilde{a}. \tag{3}$$

Подвергнем переменные x_n линейному преобразованию

$$x_n = \sum_l v(l,n) y_l \tag{4}$$

с комплексной матрицей $\boldsymbol{v} = (v(l,n))$.

Форма A перейдет при этом в форму

$$A(x, x^*) = B(y, y^*) = \sum_{n,m} b(n,m)\, y_n y_m^*, \tag{5}$$

где

$$b(n,m) = \sum_{k,l} v(n,k)\, a(k,l)\, v^*(m,l),$$

или в матричном виде

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{v}\boldsymbol{a}\tilde{\boldsymbol{v}}^*. \tag{6}$$

Говорят, что матрица $\boldsymbol{b}$ получена из матрицы $\boldsymbol{a}$ преобразованием $\boldsymbol{v}$.

Матрица $\boldsymbol{b}$ также эрмитова, так как из соотношения (3) следует, что

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{v}^*\tilde{\boldsymbol{a}}\tilde{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{v}^*\boldsymbol{a}^*\tilde{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{b}^*. \tag{7}$$

Назовем матрицу v *ортогональной*, если соответствующее преобразование оставляет инвариантной эрмитову единичную форму

$$E(x, x^*) = \sum_n x_n x_n^*.$$

Из соотношения (6) заключаем, что матрица ортогональна в том и только в том случае, если

$$\boldsymbol{v}\tilde{\boldsymbol{v}}^* = 1, \quad \text{или} \quad \tilde{\boldsymbol{v}}^* = \boldsymbol{v}^{-1}. \tag{8}$$

Например, матрицы перестановок, о которых шла речь в главе 2 (часть I), — вещественные ортогональные матрицы.

Если переменных конечно, то, как известно, ортогональную форму всегда можно преобразовать к сумме квадратов (преобразование к главным осям)[18]:

$$A(x, x^*) = \sum_n W_n y_n y_n^*. \tag{9}$$

[18] Коэффициенты преобразованной формы мы обозначаем W_n, поскольку в квантовой динамике они имеют смысл «энергии».

На языке матриц это означает следующее: существует матрица, для которой

$$\boldsymbol{v}\widetilde{\boldsymbol{v}}^* = 1 \quad \text{и} \quad \boldsymbol{v}\boldsymbol{a}\widetilde{\boldsymbol{v}}^* = \boldsymbol{v}\boldsymbol{a}\boldsymbol{v}^{-1} = \boldsymbol{W}, \tag{10}$$

где $\boldsymbol{W} = (W_n\delta_{nm})$ — диагональная матрица.

Во всех рассмотренных нами случаях существуют аналоги и для бесконечных матриц. Не исключено, однако, что индекс n в правой части помимо дискретной последовательности чисел будет пробегать и непрерывную область значений, что соответствует появлению в (9) и в преобразовании (4) интегральных слагаемых[19].

Величины W_n называются собственными значениями. Их совокупность образует математический спектр формы, состоящий из точечного и сплошного спектров. Как будет показано, математический спектр совпадает со спектром термов в физике, в то время как спектр частот возникает при дифференцировании.

Преобразование к главным осям дает решение нашей динамической задачи: найти такое преобразование $(p^0, q^0) \to (p, q)$, которое оставляло бы инвариантными перестановочные соотношения (3) (гл. 2) и одновременно переводило бы энергию в диагональную матрицу.

Действительно, как следует из приведенной нами теоремы алгебры, существует ортогональная матрица S, удовлетворяющая соотношениям

$$S\widetilde{S}^* = 1, \quad \widetilde{S}^* S = 1, \tag{11}$$

и такая, что при преобразовании

$$\begin{aligned} p_k &= Sp_k^0\widetilde{S}^* = Sp_k^0 S^{-1}, \\ q_k &= Sq_k^0\widetilde{S}^* = Sq_k^0 S^{-1} \end{aligned} \tag{12}$$

1) эрмитов характер p_k^0, q_k^0 сохраняется и при переходе к p_k, q_k;
2) остаются инвариантными перестановочные соотношения (3) (гл. 2);
3) энергия переходит в диагональную матрицу

$$H(p, q) = SH(p^0, q^0)S^{-1} = W. \tag{13}$$

Обсудим вопрос об однозначности полученного решения и прежде всего о том, может ли другое ортогональное преобразование T породить другие значения энергии. Предположим, что это так. Тогда должно выполняться соотношение

$$TH(p^0, q^0)\widetilde{T}^{-1} = W',$$

где W' — другая диагональная матрица, и

$$TS^{-1}SHS^{-1}ST^{-1} = TS^{-1}W(TS^{-1})^{-1}.$$

Таким образом, интересующий нас вопрос сводится к следующему: можно ли из диагональной матрицы W построить другую диагональную матрицу W' при помощи преобразования

$$W' = MWM^{-1}, \quad M\widetilde{M}^* = 1, \tag{14}$$

[19] Теория квадратичных (эрмитовых) форм с бесконечно большим числом переменных до сих пор была разработана лишь для особого класса форм — так называемых «ограниченных» форм (см. *Hilbert D.* Grundzuge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen; *Hellinger E.* Crelles Journ., 1910, **136**, 1). Мы же имеем дело с неограниченными формами. Тем не менее, будем предполагать, что теорема о приведении к главным осям остается в силе и в этом случае.

так, чтобы матрица W' не переходила в матрицу W при перестановке диагональных членов?

Первое из соотношений (14) можно преобразовать к виду

$$W'M - MW = 0,$$

поэтому оно означает, что

$$M(n,m)\,(W'_n - W_m) = 0. \tag{14a}$$

Из ортогональности матрицы M при $m = n$ получаем:

$$\sum_k |M(n,k)|^2 = 1, \quad \sum_k |M(k,n)|^2 = 1.$$

Следовательно, при фиксированном n ни все $M(n,k)$, ни все $M(k,n)$ не могут обратиться в нуль одновременно. Но тогда из соотношения (14a) мы заключаем, что для каждого n заведомо существует такое m, при котором $W'_n = W_m$, т.е. среди W_m содержатся все W'_n. Аналогичным образом доказывается и обратное утверждение.

Итак, все решения, получаемые (при одних и тех же p_k^0, q_k^0) при помощи соотношений (12), приводят к одним и тем же значениям энергии стационарных состояний в полном соответствии с высказанным в главе 2 предположением о том, что значения энергии всегда однозначно определяются основными динамическими уравнениями.

Вырожденные системы характеризуются тем, что обладают кратными собственными значениями. Кратность собственного значения W_n, т.е. число линейно независимых решений $v(l,n)$ уравнения (4), задает статистический вес соответствующего состояния.

Важность соотношения (9) для нашей физической теории основана на том, что в алгебре конечных или ограниченных бесконечных форм имеются различные методы[20], позволяющие находить собственные значения, не производя преобразование. Можно надеяться, что такие методы окажутся полезными в дальнейшем при рассмотрении конкретных физических систем.

§2

Применение к теории возмущений

Покажем, что излагаемый нами подход к динамической задаче не только приводит к точным формулам, выведенным в главе 1, §4 по аналогии с теорией возмущений классической механики, но и дает значительные преимущества при рассмотрении вырожденных систем в рамках предлагаемой нами теории.

Итак, предположим снова, что H имеет вид

$$H = H_0 + \lambda H_1 + \lambda^2 H_2 + \ldots$$

и что динамическая задача, определяемая функцией энергии H_0, имеет решение p_k^0, q_k^0. Величины p_k^0, q_k^0 выберем в качестве начала координат, из которого при помощи преобразования S требуется найти p_k, q_k. Предполагаемый вид функции H не накладывает, разумеется, никаких ограничений на общность, поскольку из H всегда можно выделить составляющую H_0, имеющую любой заранее заданный вид.

[20] В случае конечных форм собственные значения являются корнями некоторого алгебраического уравнения. Следовательно, для нахождения собственных значений конечных (а также ограниченных бесконечных матриц) можно воспользоваться, например, методами Греффе или Бернулли (см. *Courant C., Hilbert D.* Methoden der mathematischen Physik. Berlin: Springer, 1924. Bd. I. §3, S. 14, 15).

Лишь сходимость степенного ряда по λ зависит от того, насколько удачно выбрана составляющая H_0.

Чтобы преобразовать к главным осям эрмитову форму

$$\sum_{m,n} H_{mn} x_m x_n^*,$$

можно, как известно, поступить следующим образом.

Попытаемся решить систему линейных уравнений

$$Wx_k - \sum_l H(k,l)x_l = 0. \tag{15}$$

Решение существует лишь при определенных значениях параметра W, а именно при $W = W_n$, где W_n — собственные значения (значения энергии). Предположим сначала, что нет никакого вырождения, т. е. что все собственные значения W_n различны. Тогда каждому собственному значению W_n соответствует определенное с точностью до множителя решение $x_k = x_{kn}$. Следовательно, выполняются тождества

$$W_n x_{kn} - \sum_l H(k,l)x_{ln} = 0,$$

$$W_n x_{kn}^* - \sum_l H^*(k,l)x_{lm}^* = 0.$$

Умножив первое из них на x_{km}^*, второе — на x_{kn}, просуммировав по k и взяв разность, получим в силу эрмитовости функции энергии H соотношение

$$(W_n - W_m)\sum_k x_{kn}x_{km}^* = 0.$$

Подходящим выбором коэффициентов пропорциональности его можно свести к соотношению

$$\sum_k x_{kn}x_{kn}^* = 1,$$

означающему, что величины x_{kn} образуют ортогональную матрицу

$$S = (x_{kn}).$$

Именно матрица S преобразует заданную форму к сумме квадратов. Действительно, подставляя

$$x_k = \sum_n x_{kn} y_n$$

в форму, получаем:

$$\sum_{k,l} H(k,l)x_k x_l^* = \sum_{k,l}\sum_{m,n} H(k,l)x_{km}x_{ln}^* y_m y_n^* = \sum_{m,n}\sum_l W_m x_{lm}x_{ln}^* y_m y_n^* = \sum_m W_m y_m y_m^*.$$

По предположению, коэффициенты уравнений (15) представлены в виде

$$H(k,l) = \delta_{kl}W_l^0 + \lambda H_1(k,l) + \lambda^2 H_2(k,l) + \ldots .$$

Поэтому решение уравнений (15) следует искать в виде разложений

$$\begin{aligned} W &= W^0 + \lambda W^{(1)} + \lambda^2 W^{(2)} + \dots, \\ x_k &= x_k^0 + \lambda x_k^{(1)} + \lambda^2 x_k^{(2)} + \dots . \end{aligned} \tag{16}$$

Подставляя эти разложения в (15), получаем уравнения последовательных приближений:

$$x_k^0 (W^0 - W_k^0) = 0, \tag{17а}$$

$$x_k^{(1)} (W^0 - W_k^0) = -x_k^0 W^{(1)} + \sum_l H^{(1)}(k,l) x_l, \tag{17б}$$

$$x_k^{(2)} (W^0 - W_k^0) = -\left(x_k^{(1)} W^{(1)} + x_k^0 W^{(2)}\right) + \sum_l \left(H^{(1)}(k,l) x_l^{(1)} + H^{(2)}(k,l) x_l^0\right). \tag{17в}$$

Из (17а) следует, что параметр W должен совпадать с одним из значений W_k: в противном случае все x_k^0 должны были бы обратиться в нуль, что в свою очередь привело бы к обращению в нуль $x_k^{(1)}$, $x_k^{(2)}, \dots$ в уравнениях последующих приближений.

Если предположить, что исходная система невырождена и, следовательно, все W_k^0 различны, то решение уравнений (17а) будет иметь вид

$$W = W_n, \quad x_{nn}^0 = y_n^0, \quad x_{kn}^0 = 0 \quad \text{при} \quad k \neq n, \tag{18}$$

где y_n^0 — произвольное число.

Подставив эти значения в (17б) мы получим, в зависимости от того, будет ли $k = n$ или $k \neq n$, либо

$$y_n^0 \left(-W^{(1)} + H^{(1)}(n,n)\right) = 0 \quad (k = n),$$

либо

$$x_k^{(1)} (W_n^0 - W_k^0) = H^{(1)}(k,n) y_n^0 \quad (k \neq n).$$

Таким образом, решение уравнений первого приближения имеет вид

$$W^{(1)} = H^{(1)}, \quad x_{nn}^{(1)} = y_n^{(1)}, \quad x_{kn}^{(1)} = -\frac{H^{(1)}(k,n)}{h\nu_0(k,n)} y_n^0 \quad \text{при} \quad k \neq n, \tag{19}$$

где $y_n^{(1)}$ — снова произвольное число.

Из (17в) находим:

$$\begin{aligned} W^{(2)} &= H^{(2)}(n,n) - \frac{1}{h} \sum_l{}' \frac{H^{(1)}(n,l) H^{(1)}(l,n)}{\nu_0(l,n)}, \\ x_{nn}^{(2)} &= y_n^{(2)}, \\ x_{kn}^{(2)} &= \frac{1}{h^2} \sum_l{}' \frac{H^{(1)}(k,l) H^{(1)}(l,n)}{\nu_0(k,n)\nu_0(l,n)} - \frac{H^{(1)}(n,n) H^{(1)}(k,n)}{h^2 \nu_0(k,n)^2} - \frac{H^{(2)}(k,n)}{h\nu_0(k,n)} y_n^0 - \frac{H^{(1)}(k,n)}{h\nu_0(k,n)} y_n^{(1)}. \end{aligned} \tag{20}$$

Столь же легко вычислить решение и в третьем приближении. Приведем лишь значение энергии:

$$W^{(3)}=H^{(3)}(n,n)-\frac{1}{h}\sum_{l}{}'\frac{H^{(1)}(n,l)H^{(2)}(l,n)+H^{(2)}(n,l)H^{(1)}(l,n)}{\nu_0(l,n)}+$$
$$+\frac{1}{h^2}\left(\sum_{k,l}{}'\frac{H^{(1)}(n,l)H^{(1)}(l,k)H^{(1)}(k,n)}{\nu_0(l,n)\nu_0(k,n)}-H^{(1)}(n,n)\sum_{l}{}'\frac{H^{(1)}(n,l)H^{(1)}(l,n)}{\nu_0(l,n)^2}\right).$$

Остающиеся пока произвольные величины $y_n^{(0)}$, $y_n^{(1)}$, ... служат для нормировки решения (которое автоматически получается ортогональным). Условие

$$\sum_k x_{kn}x_{kn}^* = 1,$$

налагаемое на

$$x_{kn}=\overset{0}{x}_{kn}+\lambda x_{kn}^{(1)}+\lambda^2 x_{kn}^{(2)}+\ldots,$$

приводит к уравнениям

$$\sum_k \overset{0}{x}_{kn}\overset{*}{x}_{kn}{}^{0}=1,$$
$$\sum_k\left(\overset{0}{x}_{kn}\overset{*}{x}_{kn}{}^{(1)}+x_{kn}^{(1)}\overset{*}{x}_{kn}{}^{0}\right)=0,$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Подставляя в них полученное выше решение, находим последовательно

$$|y_n^0|^2=1,$$
$$y_n^0 y_n^{*(1)}+y_n^{*0}y_n^{(1)}=0,$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

Наконец, полагая

$$y_n^{(p)}=a_n^{(p)}e^{i\varphi_n(p)}, \tag{21}$$

получаем

$$\begin{gathered} a_n^0=1,\\ 2a_n^{(1)}\cos\left(\varphi_n^0-\varphi_n^{(1)}\right)=0,\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\ 2a_n^{(r)}\cos\left(\varphi_n^0-\varphi_n^{(1)}\right)=F^{(r)}\left(a^{(r-1)},\varphi^{(r-1)},\ldots\right). \end{gathered} \tag{22}$$

Постоянные фазы φ_n^0, $\varphi_n^{(1)}$ можно выбирать произвольно. При любых заданных фазах амплитуды a_n^0, $a_n^{(1)}$, ... вычисляются последовательно и однозначно определены. Это утверждение согласуется с ранее полученным (в главе 1, § 3) результатом, согласно которому фазы диагональных членов матрицы S остаются неопределенными.

Если найденные значения $a_n^0=1$, a_n^1, ... подставить в выражение (21), а его в свою очередь подставить в соотношения (18), (19) и (20), то станет ясно, что введенный ранее «метод возмущений» приводит к решению, при котором фазы $\varphi_n^{(p)}$ обращаются в нуль и, следовательно, диагональные элементы матрицы S вещественны.

Рассмотрим теперь случай, когда исходная система вырождена. Пусть W_n^0 — r-кратное собственное значение. Это означает, что уравнение (17а) имеет решение

$$\begin{gathered} W = W_n, \\ x_{nn}^0 = y_{1,n}^0, \quad x_{n,n+1}^0 = y_{2,n}, \quad \ldots, \quad x_{n,n+r-1}^0 = y_{r,n}^0, \\ x_{kn}^0 = 0 \quad \text{при} \quad k \neq n, n+1, \ldots, n+r-1. \end{gathered} \tag{23}$$

Тогда левая часть уравнения (17б) обращается в нуль при

$$k = n, n+1, \ldots, n+r-1,$$

и мы получаем r уравнений

$$W^{(1)} y_{kn}^0 - \sum_{l=1}^{r} H^{(1)}(n+k, n-l) y_{ln}^0 = 0, \quad k = 1, 2, \ldots, r \tag{24}$$

с эрмитовой матрицей коэффициентов.

Если определитель этой системы положить равным нулю, то для $W^{(1)}$ получится вековое уравнение r-й степени

$$\operatorname{Det}\bigl(W^{(1)}\delta_{kl} - H^{(1)}(n+k, n+l)\bigr) = 0, \tag{25}$$

корни которого заведомо вещественны. Каждому корню соответствуют одно или несколько решений уравнений (24).

Выбрав любое решение, можно продолжить для него последовательные приближения, но мы не будем останавливаться на этом.

Наша задача состоит в том, чтобы доказать применимость предлагаемого нами алгебраического метода ко всем вырождениям конечной кратности, т.е. возможность сведения исходной задачи к решению алгебраических уравнений. Например, если каждое собственное значение двукратно и, следовательно, каждому собственному значению соответствует обращающаяся в нуль частота $\nu_0(n, m)$, то задача о возмущении сводится к решению квадратного уравнения

$$\begin{vmatrix} W^{(1)} - H^{(1)}(n, n) & -H^{(1)}(n, n+1) - H^{(1)}(n+1, n) \\ -H^{(1)}(n+1, n) & W^{(1)} - H^{(1)}(n+1, n+1) \end{vmatrix} = 0.$$

Так происходит в том случае, если две первоначально одинаковые, невырожденные системы (все частоты каждой отдельной системы различны), оказываются связанными какими-нибудь силами.

Интересную интерпретацию допускает в случае вырожденных систем соотношение ортогональности

$$\sum_k x_{kn}^0 x_{kn}^{0\,*} = 1.$$

При подстановке (23) это соотношение переходит в следующее:

$$\sum_{l=1}^{r} y_{ln}^0 y_{ln}^{0\,*} = 1.$$

Отсюда мы заключаем, что если m — любое из чисел n, $n+1$, ..., $n+r-1$, а k — любое из чисел, не принадлежащих этому набору, то суммы

$$\sum_{m=n}^{n+r-1} p^0(m,k)p^{0*}(m,k),$$

$$\sum_{m=n}^{n+r-1} q^0(m,k)q^{0*}(m,k)$$

однозначно определены и в случае вырождения, т. е. инвариантны относительно преобразований, порождающих по формуле (19) (гл. 2) в случае вырождения из заданных решений p, q новые, существенно отличные от исходных решений p', q'. Этот результат служит математической формулировкой так называемой спектроскопической устойчивости, играющей важную роль в новых теориях тонкой структуры (см. главу 4).

§ 3
Непрерывные спектры

В одновременном появлении непрерывных и линейчатых спектров как решений одних и тех же уравнений движения и одних и тех же перестановочных соотношений мы усматриваем особое достоинство новой теории. Однако несмотря на тесную взаимосвязь между этими двумя разновидностями спектров, между непрерывными и дискретными спектрами существуют характерные различия, как математические, так и физические, соответствующие различию между рядами Фурье и интегралом Фурье в классической теории. Учитывая это, мы сочли необходимым изложить здесь в общих чертах наш подход к рассмотрению непрерывных спектров. Математическая теория встречающихся и бесконечных квадратичных форм спектров, непрерывно заполняющих интервалы, для случая ограниченных квадратичных форм была предложена Хеллингером в развитие основополагающих исследований Гильберта. Если нам удалось перенести результаты Хеллингера на интересующие нас неограниченные формы, то, по нашему мнению, это обусловлено тем, что методы Хеллингера полностью соответствуют физическому смыслу поставленной задачи.

Начнем с краткого рассмотрения классического аналога нашей задачи — с апериодического движения и его интеграла Фурье. В то время как в ряде Фурье гармонике $e^{2\pi i\nu t}$ всегда соответствует определенная амплитуда $a(\nu)$, в интеграле Фурье вместо $a(\nu)$ мы имеем дело с величиной вида $\varphi(\nu)d\nu$, где $\varphi(\nu)$ можно рассматривать как плотность амплитуды, приходящуюся на интервал частот $d\nu$. Аналогичным образом (что физически вполне понятно), все величины типа интенсивности, поляризации и т. д. всегда следует относить не к какой-то определенной частоте, а к интервалу частот $d\nu$, заключенному между ν и $\nu+d\nu$. Точно такого же положения дел можно ожидать и в квантовой механике. Вместо величин $q(k,l)$ в квантовой механике должны встречаться величины вида $q(k,W)dW$ или $q(W,W')dWdW'$, у которых один или оба из двух индексов пробегают значения, непрерывно заполняющие некоторую область. Более того, вместо самой энергии W в квантовой теории должна фигурировать «полная энергия» на интервал dW, поскольку в непрерывной области вероятность того, что атом обладает вполне определенной энергией W, равна нулю. Чтобы внести в эти вопросы ясность, кратко перечислим основные положения теории Хеллингера.

При рассмотрении бесконечных квадратичных форм может представиться случай, когда форму

$$\sum_{m,n} H(m,n)x_m x_n^*$$

нельзя ортогональной подстановкой привести к виду $\sum_n W_n y_n y_n^*$. По аналогии с результатами, полученными для ограниченных форм, предположим, что существует представление с непрерывным спектром

$$\sum_{m,n} H(m,n) x_m x_n^* = \sum_n W_n y_n y_n^* + \int W(\varphi) y(\varphi) y^*(\varphi) d\varphi, \tag{26}$$

в котором исходные переменные связаны с новыми переменными y_n, $y(\varphi)$ «ортогональным преобразованием». Необходимо лишь уточнить, что в данном случае надлежит понимать под ортогональным преобразованием.

Возвращаясь к линейным уравнениям (15)

$$W x_k - \sum_l H(k,l) x_l = 0, \tag{27}$$

заметим, что интегральная составляющая в (26) возникает в том случае, когда существуют не только дискретные значения W_n, для которых уравнения (27) разрешимы, но и континуум таких значений или несколько «интервалов» на оси W. Для любой точки W континуума существует одно решение $x_l(W)$ (или несколько решений, последний случай мы для простоты исключаем из рассмотрения). Таким образом, для двух значений W' и W'', принадлежащих континууму, выполняются уравнения

$$\begin{aligned} W' x_k(W') - \sum_l H(k,l) x_l(W') &= 0, \\ W'' x_k^*(W'') - \sum_l H^*(k,l) x_l^*(W'') &= 0, \end{aligned} \tag{28}$$

из которых, как и выше, следуют соотношения

$$(W' - W'') \sum_k x_k(W') x_k(W'') = 0. \tag{29}$$

Если попытаться дополнить эти соотношения ортогональности условием нормировки

$$\sum_k |x_k(W)|^2 = 1,$$

то станет ясно, что функция двух переменных

$$\sum_k x_k(W') x_k(W'')$$

(если она вообще существует) в некотором плохом смысле не обладает непрерывностью. Действительно, эта сумма не сходится и, следовательно, не представляет никакую функцию.

Отсюда мы заключаем, что необходима нормировка иного рода. Следуя Хеллингеру, положим

$$\sum_k \left| \int x_k(W) dW \right|^2 = \varphi(W). \tag{30}$$

Ряд, стоящий в левой части, в общем случае сходится и представляет некоторую монотонную функцию $\varphi(W)$. Поскольку величины $x_k(W)$ определены лишь

с точностью до множителя, не зависящего от k, то функцию $\varphi(W)$ можно выбирать произвольно (хотя и с определенными ограничениями). Физический смысл функции $\varphi(W)$, позволяющий однозначно находить решения $x_k(W)$, мы рассмотрим ниже. Хеллингер называет $\varphi(W)$ «базисной функцией» и показывает, что условия ортогональности можно привести к следующему виду. Пусть Δ_1 и Δ_2 — любые два интервала «кусочно-непрерывного» спектра, а Δ_{12} — их общая часть (которая может отсутствовать). Тогда

$$\sum_k \int_{\Delta} x_k(W')dW' \int_{\Delta} x_k(W'')dW'' = \int_{\Delta_{12}} d\varphi(W) = \varphi(W^{(2)}) - \varphi(W^{(1)}), \tag{31}$$

где $W^{(1)}$ и $W^{(2)}$ — концы интервала Δ_{12}. Если интервалы Δ_1 и Δ_2 не перекрываются, то справа в (31) стоит нуль.

Если считать, что интервалы Δ_1, Δ_2 и Δ_{12} очень малы, то символически можно записать соотношение

$$\sum_k x_k(W')dW' x_k(W'')dW'' = d\varphi(W). \tag{32}$$

Оно наводит на мысль оперировать с величинами $x_k(W)dW$ как с «дифференциальными решениями» уравнений (27). При таком подходе необходимо лишь не упускать из виду, что соответствующие уравнения всегда следует интерпретировать в смысле интегральных соотношений (31). Тогда дифференциальные решения ортогональны в обычном смысле, но нормированы не на единицу, а на дифференциал базисной функции $\varphi(W)$.

Совокупность дискретных значений x_{kn} и дискретных по одному и непрерывно распределенных по другому индексу значений $x_k(W)$ образует элементы «ортогональной» матрицы

$$\mathfrak{S} = (x_{kn}, x_k(W)dW),$$

которую схематически можно изобразить следующим образом:

$$\mathfrak{S} = \left(\begin{array}{c|ccccc} & k \longrightarrow & & & & \\ n & \cdot & \vdots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \downarrow & \vdots & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ & \vdots & \cdot & \cdot & \cdot & \vdots \\ & \cdot & \vdots & \cdot & \cdot & \cdot \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \cdot & \vdots \\ w & | & | & | & | & | \\ \downarrow & | & | & | & | & | \end{array} \right). \tag{33}$$

Соотношения ортогональности и нормировки для всей матрицы распадаются на четыре различных типа:

$$\begin{gathered} \sum_k x_{km} x^*_{kn} = \delta_{mn}, \\ \sum_k x_{km} x^*_k(W)\, dW = 0, \\ \sum_k x_k(W)\, dW x^*_{kn} = 0, \\ \sum_k x_k(W')\, dW' x^*_k(W'')\, dW'' = d\varphi. \end{gathered} \tag{34}$$

Соотношения ортогональности можно выписать для столбцов. Они имеют следующий вид:

$$\sum_n x_{kn}x_{ln}^* + \int \frac{x_k(W)dWx_l^*(W)dW}{d\varphi} = \sum_n x_{kn}x_{ln}^* + \int \frac{dW}{\varphi'}x_k(W)x_l^*(W) = \delta_{kl}, \quad (35)$$

где $\varphi' = \frac{d\varphi}{dW}$.

С помощью матрицы S переменные x_n необходимо преобразовать в новые переменные y_n, $y(\varphi)d\varphi$.

Полагаем

$$\begin{aligned} y_n &= \sum_k x_{kn}x_k, \\ y(\varphi)\,d\varphi &= \sum_k x_k(W)\,dWx_k. \end{aligned} \quad (36)$$

Затем следуют несложные выкладки:

$$\sum_n W_n\,y_n\,y_n^* + \int W(\varphi)\,y(\varphi)\,y^*(\varphi)\,d\,\varphi = \sum_{k,l} H(k,l)\,x_k\,x_l^*. \quad (37)$$

Итак, преобразование к главным осям выполнено.

Выясним теперь, во что перейдут под действием ортогонального преобразования S матрицы координат и импульсов, т. е. что означают соотношения

$$\begin{aligned} p &= Sp_0S^{-1}, \\ q &= Sq_0S^{-1}, \end{aligned} \quad (38)$$

или, в общем виде,

$$f(p,q) = Sf(p_0,q_0)S^{-1}. \quad (39)$$

Оказывается, что, например, для p существуют элементы четырех типов:

$$\begin{aligned} p(m,n) &= \sum_{k,l} x_{km}^*p^0(k,l)x_{lp}, \\ p(m,W)dW &= \sum_{k,l} x_{km}^*p^0(k,l)x_l(W)dW, \\ p(W,n)dW &= \sum_{k,l} x_k^*(W)dWp^0(k,l)x_{ln}, \\ p(W',W'')dW'dW'' &= \sum_{k,l} x_k^*(W')dW'p^0(k,l)x_l(W'')dW''. \end{aligned} \quad (40)$$

Аналогичным образом, в соответствии с нашими предсказаниями вместо амплитуд $p(m,n)$ в случае одного непрерывно изменяющегося индекса войдут «плотности амплитуд» $p(m,W)dW$, относящиеся к интервалу dW. Вводить в качестве непрерывно изменяющегося индекса энергию отнюдь не обязательно. Вместо энергии можно ввести, например, величину $\varphi(W)$. Тогда вместо $p(m,W)$ в расчетах будет фигурировать величина $p(m,\varphi)\frac{dW}{d\varphi}d\varphi$. Наконец, дискретные значения энергии W_n в непрерывном случае переходят в величины $W(\varphi)\,d\varphi$. Энергию отдельного атома заменяет своего рода полная энергия, приходящаяся на интервал dW. Поэтому $d\varphi$ по существу означает число атомов с энергией от W до $W + dW$ или априорную

вероятность того, что энергия атома лежит в интервале от W до $W + dW$. Различие между дискретными стационарными состояниями и непрерывными множествами состояний выступает здесь особенно отчетливо, и становится видна простая взаимосвязь задачи о статистических весах с вопросом о нормировке решения уравнений (27). В случае дискретных состояний мы при некратных собственных значениях принимаем простое физическое допущение о том, что статистический вес каждого состояния равен 1. Тем самым величины x_{kn} мы нормируем, вводя требование

$$\sum x_{nk} x^*_{kn} = 1.$$

В случае непрерывных множеств состояний столь простое задание априорных вероятностей становится невозможным. Для нахождения вероятностей и, следовательно, для установления функции φ необходимы более глубокие исследования соответствующей задачи. Поэтому и взаимосвязь вероятностей переходов с амплитудами в случае непрерывных спектров имеет несколько более сложный характер, чем в случае линейчатых спектров.

Матрицы p, q или $f(p, q)$ задаваемые соотношениями (40) и соответствующими формами, можно изобразить в виде следующей схемы:

$$\left(\begin{array}{c|c|c} & n \longrightarrow & w'' \longrightarrow \\ m & \cdot\;\cdot\;\cdot\;\cdot\;\cdot & ——— \\ \big\downarrow & \cdot\;\cdot\;\cdot\;\cdot\;\cdot & ——— \\ w' & |\;|\;|\;|\;| & /\!/\!/\!/\!/ \\ \big\downarrow & |\;|\;|\;|\;| & /\!/\!/\!/\!/ \end{array}\right).$$

Поясним ее физический смысл.

Существуют четыре типа переходов, образующих простые аналоги переходов, которые постулируются в теории атома водорода: 1) с эллипса на эллипс; 2) с эллипса на гиперболу; 3) с гиперболы на эллипс; 4) с гиперболы на гиперболу.

Против формул (38) и (40) можно возразить, что бесконечные суммы, стоящие в их правых частях, в некоторых случаях не сходятся и, следовательно, не задают никакую функцию, поскольку и в классической теории функцию $f(p, q)$ иногда бывает невозможно представить в виде интеграла Фурье, например, если функция f при больших временах возрастает линейно по времени (как это обычно происходит с координатами). Однако в ответ на это возражение можно сослаться на то, что наблюдаемые действия атомов (излучение, сила, с которой одни атомы действуют на другие, и т. д.) обычно описываются такими функциями, что соответствующие суммы типа формул 40, сходятся.

Глава 4

ФИЗИЧЕСКИЕ ПРИЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ

§1

Законы сохранения импульса и момента импульса

Формулы для вычисления интенсивностей и правила отбора. В качестве приложения развитой в предыдущих главах общей теории выведем известные факты относительно квантования момента импульса и некоторых связанных с ним закономерностей.

Попутно мы познакомимся с несколькими характерными примерами *интегрирования* квантовомеханических уравнений движения. Рассмотренные нами ранее методы теории возмущений можно успешно применять лишь в том случае, если нам удастся подобрать ряд особенно простых примеров, интегрируемых другим способом, которые можно было бы выбирать в качестве невозмущенных систем H_0. Квантовомеханические уравнения движения, возникающие при разложении матричных уравнений движения на отдельные компоненты, порождают особую трудность, состоящую в том, что за исключением гармонического осциллятора в каждое отдельное уравнение входит бесконечно много переменных. Способ преодоления этой трудности, который неоднократно понадобится нам в дальнейшем и, по-видимому, применяется весьма часто, состоит в следующем. Сначала по аналогии с классической теорией интегралов уравнений движения находят такую функцию $A(p,q)$, которая в силу уравнений движения и перестановочных соотношений постоянна по времени и поэтому в случае невырожденных периодических систем оказывается диагональной матрицей. Если $\varphi(p,q)$ — произвольная функция, то, пользуясь перестановочными соотношениями, можно вычислить разность

$$\varphi A - A\varphi = \psi.$$

Если A — диагональная матрица, то получается система уравнений, содержащая лишь конечное число неизвестных, а именно единственные компоненты матриц φ и ψ (и два диагональных члена матрицы A).

Если в декартовых координатах выполняются соотношение $H = H'(p) + H''(q)$ (в котором содержится и релятивистская механика), то, как нетрудно видеть, компоненты момента импульса

$$\begin{aligned} M_x &= \sum_{k=1}^{f/3}(p_{ky}q_{kz} - q_{ky}p_{kz}), \\ M_y &= \sum_{k=1}^{f/3}(p_{kz}q_{kx} - q_{kz}p_{kx}), \\ M_z &= \sum_{k=1}^{f/3}(p_{kx}q_{ky} - q_{kx}p_{ky}) \end{aligned} \tag{1}$$

при тех же условиях, что и в классической теории, постоянны по времени. Действительно, взяв производную по времени, например от M_z, получим сумму

$$\dot{M}_z = \varphi(q) + \psi(p),$$

а в силу перестановочности всех p между собой и всех q между собой величины φ и ψ обращаются в нуль при тех же условиях, что и в классической теории.

То же замечание относится и к импульсу

$$p = \sum_{k=1}^{f/3} p_k,$$

т. е. его компоненты

$$p_{(x)} = \sum_{k=1}^{f/3} p_{kx} \tag{2}$$

также постоянны по времени. Следовательно, как и в классической теории, сохраняется теорема о движении центра масс.

Отметим также одну формулу, которая понадобится нам в дальнейшем. Ее нетрудно вывести из перестановочных отношений (3) (гл. 2):

$$M_xM_y-M_yM_x=\sum_{k,l}\{(p_{ky}q_{kx}-q_{ky}p_{kx})(p_{lz}q_{lx}-q_{lz}p_{lx})-(p_{kz}q_{kx}-q_{kz}p_{kx})(p_{ly}q_{lz}-q_{ly}p_{lz})\}=$$

$$=\sum_{k,l}\{p_{ky}q_{lx}(q_{kz}p_{lz}-p_{lz}q_{kz})+q_{ky}p_{lx}(p_{kz}q_{lz}-q_{lz}p_{kz})\}=$$

$$=\frac{h}{2\pi i}\sum_{k}(p_{kx}q_{ky}-q_{kx}p_{ky}),$$

следовательно,

$$M_xM_y-M_yM_x=\varepsilon M_z \quad \left(\varepsilon=\frac{h}{2\pi i}\right). \tag{3}$$

Непосредственно из этой формулы видно, что закон площадей, как и в классической теории, выполняется либо не более чем для одной оси, либо для всех трех осей.

Условимся считать в дальнейшем, что рассмотрение интересующей нас задачи методами, развитыми в предыдущей главе, приводит к *дискретным* значениям энергии (точечному спектру). Если для *невырожденной* системы $\dot{M}_z=0$ (таков, например, случай, когда на атом действуют силы, симметричные относительно оси z), то компонента M_z должна быть *диагональной матрицей*. Отдельные диагональные члены можно считать моментами импульса атома относительно оси z для соответствующих *состояний* атома. Обратимся теперь к движению электронов. Прежде всего заметим, что из соотношений (1) следует соотношение

$$q_{lz}M_z-M_zq_{lz}=0, \tag{4}$$

а поскольку $M_z(n,m)=\delta_{nm}M_{zn}$, то

$$q_{lz}(n,m)(M_{zn}-M_{zm})=0. \tag{5}$$

Итак, *«плоскость колебаний» «сферической волны», излучаемой при квантовом скачке с изменением компоненты момента импульса M_z, перпендикулярна оси z*. Кроме того, выполняются соотношения

$$\begin{aligned} q_{lx}M_z-M_zq_{lx}&=-\varepsilon q_{ly},\\ q_{ly}M_z-M_zq_{ly}&=\varepsilon q_{lx}, \end{aligned} \tag{6}$$

в силу чего

$$\begin{aligned} q_{lx}(n,m)(M_{zn}-M_{zm})&=-\varepsilon q_{ly}(n,m),\\ q_{lz}(n,m)(M_{zn}-M_{zm})&=-\varepsilon q_{lz}(n,m). \end{aligned} \tag{7}$$

Таким образом, *свет, излучаемый при квантовом скачке без изменения компоненты момента импульса M_z, поляризован параллельно оси z*. Но из соотношений (7) в свою очередь следует, что

$$\left\{(M_{zn}-M_{zm})^2-\frac{h^2}{4\pi^2}\right\}q_{l\eta}(n,m)=0, \quad \eta=x,\ y, \tag{8}$$

и мы заключаем, наконец: *при каждом квантовом скачке величина M_{zn} изменяется на* 0 *или на* $\pm h/2\pi$. *В последнем случае, как показывают соотношения* (7), *излучаемый свет поляризован по кругу*. Полученные выше результаты относительно возможных изменений M_z позволяют представить M_{zn} в виде

$$M_{zn}=\frac{h}{2\pi}(n_1+C), \quad n_1=\ldots-2,\ -1,\ 0,\ 1,\ 2,\ \ldots. \tag{9}$$

12 Зак. 6

Если бы существовали состояния с моментами импульса, не принадлежащими последовательности (9), то между такими состояниями и состояниями, описываемыми формулой (9), не могли бы происходить переходы и осуществляться взаимодействие. Соотношение (9) позволяет произвести расщепление числа n на две компоненты, одна из которых совпадает с одним из чисел n_1 из последовательности (9), а другая компонента n_2 пробегает другие значения n с тем же n_1. Наши матрицы становятся при этом четырехмерными, а полученные результаты относительно движения электронов можно резюмировать следующим образом:

$$q_{lz}(n,m) = \delta_{n_1,m_1} q_{lz}(n,m), \tag{10}$$

$$\left.\begin{aligned} q_{lx}(n,m) &= \delta_{1,|n_1-m_1|} q_{lx}(n,m), \\ q_{ly}(n,m) &= \delta_{1,|n_1-m_1|} q_{ly}(n,m) \end{aligned}\right. \tag{10'}$$

$$q_{lx}(n_1,n_2;n_1\pm 1,m_2) \mp i q_{ly}(n_1,n_2;n_1\pm 1,m_2) = 0. \tag{10''}$$

Кроме того, из (4) и (6) следует (если положить $\boldsymbol{q}_l^2 = q_l^2 = q_{lx}^2 + q_{ly}^2 + q_{lz}^2$):

$$q^2 M_z - M_z q_l^2 = 0. \tag{11}$$

Это соотношение означает, что q_l^2 относительно «квантового числа» n_1 является диагональной матрицей.

Соотношения (4)–(7) и (10), (11) остаются в силе, если q_{lx}, q_{ly}, q_{lz} заменить величинами

$$p_{lx}, p_{ly}, p_{lz} \quad \text{или} \quad M_x, M_y, M_z.$$

В частности, выполняются соотношения

$$\left.\begin{aligned} M_x(n,m) &= \delta_{1,|n_1-m_2|} M_x(n,m), \\ M_y(n,m) &= \delta_{1,|n_1-m_2|} M_y(n,m), \\ M_x(n_1,n_2;n_1\pm 1,m_2) &\mp i M_y(n_1,n_2;n_1\pm 1,m_2) = 0. \end{aligned}\right. \tag{12}$$

Величина $\boldsymbol{M}^2 = M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$ (см. соотношение (1)) является диагональной матрицей относительно n_1: действительно,

$$M^2 M_z - M_z M^2 = 0. \tag{13}$$

Если для системы выполняются все три закона площадей, то все три постоянные компоненты момента импульса M заведомо не могут быть диагональными матрицами. В противном случае к каждой из компонент были бы применимы соображения, изложенные выше относительно M_z — диагональная матрица. Следовательно, такая система обязательно *вырождена.*

Рассмотрим теперь систему $H = H_0 + \lambda H_1 + \ldots$ следующего типа. *При $\lambda = 0$ выполняются все три закона площадей. При $\lambda \neq 0$ система невырождена. Компонента момента импульса M_z остается постоянной. Энергия H_0 не зависит от n_1*. Результаты, полученные нами при $\lambda \neq 0$, частично переносятся на вырожденную систему H_0, а именно: они остаются в силе, поскольку *она не зависит, во-первых, от λ и, во-вторых, от выделенного направления z.*

Вырождение системы рассматриваемого типа при $\lambda = 0$ выражается в том, что $\dot{M}_x$, $\dot{M}_y$, не содержат членов нулевой степени по λ. Следовательно,

$$\left.\begin{aligned} \nu_0(n,m) M_\eta(n,m) &= 0, \quad \eta = x,\ y; \\ \nu_0(n,m) M^2(n,m) &= 0. \end{aligned}\right. \tag{14}$$

Так как W_0 не зависит от введенного ранее квантового числа n_1, то $\nu_0(n_1, n_2; m_1, n_2) = 0$, в то время как $\nu_0(n_1, n_2; m_1, m_2) \neq 0$ при $n_2 \neq m_2$. Учитывая это, получаем из (14):

$$M_\eta^0(n, m) = \delta_{n_2,m_2} M_\eta^0(n, m),$$
$$M^{0^2}(n, m) = \delta_{n_2,m_2} M^{0^2}(n, m). \tag{15}$$

Как показывают соотношения (13), (15), квадрат полного момента импульса M^{0^2} является диагональной матрицей. Двойная сумма, представляющая элемент матрицы M_x^0, M_y^0 вырождается в простую сумму

$$\sum_{k_1,k_2} M_x^0(n_1, n_2; k_1, k_2) M_y^0(k_1, k_2; m_1, m_2) =$$
$$= \delta_{n_2 m_2} \sum_{k_1} M_x^0(n_1, n_2; k_1, k_2) M_x^0(k_1, n_2; m_1, n_2), \tag{16}$$

которая в силу того, что при фиксированном n_2 число возможных значений n_1 конечно (члены $M^{0^2} = M_x^{0^2} + M_y^{0^2} + M_z^{0^2} \geqslant M_z^{0^2}$ не зависят от n_1), содержит лишь конечное число слагаемых. Записав соотношения (3) для M_x^0, M_y^0, M_z^0 и просуммировав по n_1 все соотношения, соответствующие одному и тому же значению n_2, получим при фиксированном n_2 [21]:

$$\sum_{n_1} M_z(n_1, n_2; m_1, n_2) = \sum_{n_1} (n_1 + C)\frac{h}{2\pi} = 0. \tag{17}$$

Заметим, что в силу соотношений (12) и (16) сумма (17) обращается в нуль для *каждого* полного набора квантовых чисел n_1. Отсюда следует, что при фиксированном n_2 допустимые значения $n_1 + C$ образуют полный набор и *расположены симметрично относительно нуля.* Таким образом, $n_1 + C$ — *либо целые, либо «полуцелые» числа*, т. е. элементы последовательности $\ldots, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, \ldots$. Если для момента импульса M_z вокруг оси z вместо $(n_1 + C)h/2\pi$ ввести принятое в литературе обозначение $mh/2\pi$, то окажется, что мы доказали для m правило отбора

$$m \to \begin{cases} m + 1, \\ m, \\ m - 1, \end{cases}$$

где m — целое или полуцелое число.

Из нашего результата следует также, что в предлагаемой нами теории не возникает необходимости во введении запретов на некоторые состояния (в существующей ныне теории атома водорода такие запреты приходится вводить, чтобы исключить столкновение электрона с ядром).

Попытаемся теперь, исходя из соотношений (5) и (8), вывести принцип отбора для квантового числа полного момента импульса, а из основных уравнений нашей теории — интенсивности при эффекте Зеемана.

Напомним классическую теорию правил отбора. Если ввести систему координат с осью z, совпадающей с направлением полного момента импульса, то в новых координатах относительно $\boldsymbol{M}$ можно вывести те же результаты, которые были

[21] На то, что в случае конечной суммы диагональных членов всегда выполняется соотношение $D(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}) = D(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{a})$, мы обращали внимание еще в части I.

получены для M_z. Итак, следуя классической теории, построим такую систему координат x', y', z'. Чтобы ось z' совпадала с направлением полного момента импульса, должно выполняться соотношение

$$z' = x\frac{M_x}{M} + y\frac{M_y}{M} + z\frac{M_z}{M}.$$

(Индекс ^{0} у компонент момента импульса и координат мы для простоты условимся в дальнейшем опускать; все вычисления проводятся в пределе при $\lambda = 0$.) Кроме того, мы можем расположить систему координат так, чтобы ось x' лежала в плоскости xy. Этим всякий произвол в выборе новой системы координат полностью устраняется, и мы получаем

$$x' = y\frac{M_y}{\sqrt{M_x^2+M_y^2}} - x\frac{M_y}{\sqrt{M_x^2+M_y^2}},$$
$$y' = \frac{z(M_x^2+M_y^2) - xM_zM_x - yM_xM_y}{M\sqrt{M_z^2+M_y^2}}.$$

Попытаемся применить аналогичный метод в квантовой механике. Введем три величины:

$$\begin{aligned} Z_l &= q_{lx}M_x + q_{ly}M_y + q_{lz}M_z, \\ X_l &= q_{ly}M_x - M_yq_{lx}, \\ Y_l &= M_xq_{lz}M_x + M_yq_{lz}M_y - q_{lx}M_zM_x - M_yM_zq_{ly}. \end{aligned} \tag{18}$$

Для вывода интересующих нас правил отбора нам понадобятся еще некоторые перестановочные соотношения, вытекающие из соотношений (4) и (6):

$$q_{lx}M^2 - M^2q_{lx} = 2\varepsilon(q_{lz}M_y - M_zq_{ly}), \tag{19}$$

где $\varepsilon = h/2\pi i$ и аналогичные соотношения для q_{ly}, q_{lz}, получающиеся из (19) при циклической перестановке. Из соотношений (3), (4), (6) и (19) получаем[22]:

---

[22] Для вывода первой и третьей формул из (20) необходимо произвести лишь самые простейшие выкладки. Вторую формулу можно вывести следующим образом. Из соотношения (18) находим:

$$Y_l = M_xq_{lz}M_x + M_yq_{ly}M_y - q_{lx}M_zM_x - M_yM_zq_{ly},$$

а соотношение (6) позволяет преобразовать Y_l к виду

$$\begin{aligned} Y_l &= q_{lz}(M_x^2+M_y^2) - \varepsilon q_{ly}M_x + \varepsilon M_yq_{lx} + \varepsilon^2q_{lz} - q_{lx}M_zM_x - M_yM_zq_{ly} = \\ &= q_{lz}(M^2-M_z^2) - \varepsilon X_l + \varepsilon^2q_{lz} - q_{lx}M_zM_x - M_yM_zq_{ly}. \end{aligned}$$

При вычислении $Y_lM^2 - M^2Y_l$ следует иметь в виду, что M^2 коммутирует с M_x, M_y, M_z. Поэтому вторую часть выписанной выше формулы для Y_l можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} &(q_{lx}M_zM_x + M_yM_zq_{ly})M^2 - M^2(q_{lx}M_zM_x + M_yM_zq_{ly}) = (\text{см. } (19)) = \\ &\quad = 2\varepsilon(q_{lz}M_yM_zM_x - M_zq_{ly}M_zM_x + M_yM_zq_{lx}M_z - M_yM_zM_xq_{lz}). \end{aligned}$$

Далее, если учесть (см. (19)), что $q_{lz}M^2 - M^2q_{lz} = 2\varepsilon X_l$, то из перестановочных соотношений получаем

$$\begin{aligned} q_{lz}M_yM_zM_x - M_yM_zM_xq_{lz} &= \varepsilon(M_yM_zq_{ly} - q_{lx}M_zM_x), \\ M_yM_zq_{lx}M_z - M_zq_{ly}M_zM_x &= -X_lM_z^2 - \varepsilon(M_zq_{ly}M_y - q_{lx}M_xM_z) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} X_l M^2 - M^2 X_l &= 2\varepsilon Y_l, \\ Y_l M^2 - M^2 Y_l &= \varepsilon\left(X_l M^2 + M^2 X_l\right), \\ Z_l M^2 - M^2 Z_l &= 0. \end{aligned} \tag{20}$$

Эти соотношения полностью аналогичны соотношениям (4) и (6), задающим правила отбора для M_z. Поскольку дальше будет показано, что q_{lx}, q_{ly}, q_{lz} действительно представимы в виде линейных комбинаций от X_l, Y_l, Z_l с постоянным по времени при $\lambda = 0$ коэффициентами, то из (20) мы можем непосредственно получить правила отбора для M. Так как M^2 — диагональная матрица, то из (20) получаем:

$$\begin{aligned} X_l(n,m)\left(M_m^2 - M_n^2\right) &= -2\varepsilon Y_l(n,m), \\ Y_l(n,m)\left(M_m^2 - M_n^2\right) &= -\varepsilon X_l(n,m)\left(M_m^2 + M_n^2\right), \\ Z_l(n,m)\left(M_m^2 - M_n^2\right) &= 0. \end{aligned} \tag{21}$$

Последнее из соотношений (21) означает, что Z не претерпевает никаких колебаний, которые соответствовали бы изменениям M^2. Из первых двух соотношений следует, что

$$X_l(n,m)\left\{\left(M_m^2 - M_n^2\right)^2 - \frac{h^2}{2\pi^2}\left(M_m^2 + M_n^2\right)\right\} = 0. \tag{22}$$

Полагая $M_m^2 = (h/2/\pi)^2\left(a_m^2 - 1/4\right)$ (где a_m — любая функция квантовых чисел), преобразуем (22) к виду

$$X_l(n,m)\left((a_n - a_m)^2 - 1\right)\left((a_n + a_m)^2 - 1\right) = 0,$$

или, если $X_l(n,m)$ не обращается в нуль,

$$a_n = \pm a_m \pm 1. \tag{23}$$

Соотношение (23) не ограничивает общность, если считать, что величина a_m всегда положительна и удовлетворяет неравенству $a_m \geqslant 1/2$. Таким образом, значения a_m образуют последовательность вида C, $1 + C$, $2 + C$, $\ldots$, где C — некоторая постоянная $\geqslant 1/2$. Если положить $a_m = j + 1/2$, то

$$M^2 = j(j+1)\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2, \tag{24}$$

и для j выполняется принцип отбора

$$j \to \begin{cases} j+1, \\ j, \\ j-1. \end{cases}$$

Этот результат формально напоминает значения M^2, входящие в формулу для g-фактора Ланде.

и, наконец, вторую формулу (20), которую требовалось вывести:

$$\begin{aligned} Y_l M^2 - M^2 Y_l &= 2\varepsilon X_l(M^2 - M_z^2 + \varepsilon^2) - \varepsilon(X_l M^2 - M^2 X_l) + 2\varepsilon X_l M_z^2 - \\ &\quad - 2\varepsilon^2(q_{lx}M_xM_z - q_{lx}M_zM_x + M_yM_zq_{ly} - M_zM_yq_{ly}) = \\ &= 2\varepsilon X_l(M^2 - M_z^2 + \varepsilon^2) - \varepsilon(X_l M^2 - M^2 X_l) + 2\varepsilon X_l M_z^2 - 2\varepsilon^3 X_l = \varepsilon(X_l M^2 + M^2 X_l). \end{aligned}$$

Если M_z обозначить через $mh/2\pi$, то из (12) и соотношений

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$$

и

$$(M_x + iM_y)(M_x - iM_y) = M_x^2 + M_y^2 - i\varepsilon M_z = M^2 - M_z^2 - i\varepsilon M_z,$$

получим:

$$\begin{aligned} M_x(j, m-1; j, m) + iM_y(j, m-1; j, m) &= \frac{h}{2\pi}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}, \\ M_x(j, m; j, m-1) - iM_y(j, m; j, m-1) &= \frac{h}{2\pi}\sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \end{aligned} \tag{25}$$

Максимальное значение $m_{\max}$ чисел m при заданном значении j характеризуется тем, что скачки $m_{\max} \to m_{\max} + 1$ не происходят, т. е. для таких скачков правая часть соотношения (24) обращается в нуль. Отсюда следует, что

$$j = j_{\max}.$$

Итак, *j также может принимать только целые и полуцелые значения.*

Вывод формул для интенсивностей в случае эффекта Зеемана, т. е. вывод зависимости q_{lx}, q_{ly}, q_{lz} от m представляется теперь весьма простым. Разрешив соотношения (18) относительно q_{lx}, q_{ly}, q_{lz}, получим:

$$\begin{aligned} q_{lz} &= \left(Z_l M_z + \varepsilon X_l + Y_l\right) M^{-2}, \\ q_{lx} + iq_{ly} &= \left(Z_l - q_{lz}(M_z + i\varepsilon) + iX_l\right)\left(M_x - iM_y\right)^{-1}, \\ q_{lx} - iq_{ly} &= \left(Z_l - q_{lz}(M_z - i\varepsilon) - iX_l\right)\left(M_x + iM_y\right)^{-1}. \end{aligned} \tag{26}$$

Эти соотношения содержат пропущенное ранее доказательство того, что q_{lx}, q_{ly}, q_{lz} представимы в виде линейных комбинаций величин X_l, Y_l, Z_l с коэффициентами, постоянными по времени при $\lambda = 0$. Кроме того, соотношения (26) содержат интересующие нас формулы интенсивностей. Чтобы убедиться в этом, заметим прежде всего, что X_l, Y_l и Z_l относительно m — диагональные матрицы, так как

$$\begin{aligned} X_l M_z - M_z X_l &= 0, \\ Y_l M_z - M_z Y_l &= 0, \\ Z_l M_z - M_z Z_l &= 0. \end{aligned} \tag{27}$$

Наша задача распадается теперь на две части: на вычисление интенсивностей при переходах $j \to j$ и $j \to j-1$ (переходы $j \to j+1$ не дают ничего нового). Рассмотрим сначала переходы $j \to j$. Как следует из соотношений (20), для таких переходов сохраняются лишь члены в Z_l. Обозначим их $Z_l(j, m)$. Из (26), учитывая, что $M_z = mh/2\pi$ и соотношения (24), получаем

$$\begin{aligned} q_{lz} &= \frac{2\pi}{h} Z_l(j, m) \frac{m}{j(j+1)}, \\ (q_{lx} + iq_{ly})(j, m-1; j, m) &= \frac{2\pi}{h} Z_l(j, m-1)\sqrt{\frac{j(j+1) - m(m-1)}{j(j+1)}}, \\ (q_{lx} - iq_{ly})(j, m; j, m-1) &= \frac{2\pi}{h} Z_l(j, m)\sqrt{\frac{j(j+1) - m(m-1)}{j(j+1)}}. \end{aligned} \tag{28}$$

Наконец, чтобы выяснить характер зависимости величин $Z_l(j,m)$ от m, воспользуемся соотношением

$$M_x q_{ly} - q_{ly} M_x = \varepsilon q_{lz}. \tag{29}$$

В нашем случае из него следует, что величины $Z_l(j,m)$ не зависят от m. Итак, для переходов $j \to j$ получаем:

$$q_{lz}(j,m) : (q_{lx} + iq_{ly})(j, m-1; j, m) : (q_{lx} - iq_{ly})(j, m; j, m-1) =$$
$$= m : \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} : \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}. \tag{30}$$

Переходы $j \to j-1$ рассматриваются аналогично. Для этих переходов из (21) следует соотношение $X_l(j,m;j-1,m) = \frac{\varepsilon}{j} Y_l(j,m;j-1,m)$. Если мы воспользуемся формулами (26) и выразим интенсивности через $X_l(j,m;j-1,m)$, то придем к следующим результатам:

$$\begin{aligned} q_{lz}(j,m;j-1,m) &= i\frac{2\pi}{h} X_l(j,m;j-1,m)\frac{1}{j}, \\ (q_{lx} + iq_{ly})(j,m;j-1,m) &= i\frac{2\pi}{h} X_l(j,m-1;j-1,m-1)\frac{\sqrt{j-m}}{j\sqrt{j+m-1}}, \\ (q_{lx} - iq_{ly})(j,m;j-1,m-1) &= -i\frac{2\pi}{h} X_l(j,m;j-1,m)\frac{\sqrt{j+m-1}}{j\sqrt{j-m}}. \end{aligned} \tag{31}$$

Наконец, чтобы установить зависимость величин $X_l(j,m;j-1,m)$ от m, воспользуемся снова соотношением (29). После несложных вычислений получим:

$$X_l(j,m;j-1,m) = A(j,j-1)\sqrt{j^2 - m^2}. \tag{32}$$

Итак, интенсивности удовлетворяют соотношению

$$q_{lz}(j,m;j-1,m) : (q_{lx} + iq_{ly})(j,m-1;j-1,m) : (q_{lx} - iq_{ly})(j,m;j-1,m-1) =$$
$$= \sqrt{j^2 - m^2} : \sqrt{(j-m)(j-m+1)} : -\sqrt{(j+m)(j+m-1)}. \tag{33}$$

Переходы $j \to j+1$ дают по существу те же интенсивности:

$$q_{lz}(j,m;j+1,m) : (q_{lx} + iq_{ly})(j,m;j+1,m+1) : (q_{lx} - iq_{ly})(j,m+1;j+1,m) =$$
$$= \sqrt{(j+1)^2 - m^2} : \sqrt{(j+m+2)(j+m+1)} : -\sqrt{(j-m+1)(j-m)}. \tag{34}$$

Формулы (30), (33) и (34) совпадают с формулами для интенсивностей, выведенными на основе принципа соответствия[23]

Укажем на одно простое следствие из соотношений (21): переходы $\Delta j = 0$ происходят только в «направление Z_l». Если мы рассматриваем движение единственного электрона вокруг ядра, т. е. атом водорода, то непосредственно из (1) следует, что Z обращается в нуль. Таким образом, в этом случае переходы $\Delta j = 0$ вообще не происходят.

[23] *Goudsmit S., Kronig R. de L.* Naturwiss., 1925, **13**, 90; *Hönl H.* Zs. Phys., 1925, **32**, 340.

§ 2
Эффект Зеемана

Если и в квантовой механике магнитное поле H действует на электрон с силой Лоренца $\frac{e}{c}(vH)$, то на первый взгляд кажется очевидным, что для атомов наблюдается нормальный эффект Зеемана. Действительно, при тех же самых предположениях, при которых выводится теорема Лармора для атома с ядром, а именно в предположении о пренебрежимой малости членов с H^2, теорема Лармора доказывается и в квантовой механике. Тем не менее между квантовой механикой и классической теорией имеется определенное различие в обосновании возможности пренебречь членами с H^2. В классической теории пренебрежение членами с H^2 заведомо допустимо для орбит малых размеров и заведомо недопустимо для очень больших или даже гиперболических орбит. В квантовой механике все эти орбиты, как самые далекие внешние, так и внутренние, вследствие специфической кинематики квантовой механики столь тесно взаимосвязаны, что обоснование возможности пренебречь членами с H^2 далеко не просто. Сами по себе вероятности переходов из основного состояния к свободным электронам довольно значительны.

Итак, для осциллятора мы безусловно имеем нормальный эффект Зеемана. Наоборот, для атома с ядром не исключено, что тесная взаимосвязь между дальними внешними и внутренними орбитами приводит к результатам, несколько отклоняющимся от нормального эффекта Зеемана. Однако необходимо подчеркнуть, что имеется целый ряд весомых возражений против возможности интерпретации аномального эффекта Зеемана на этой основе. Более того, по-видимому, можно надеяться, что гипотеза Уленбека—Гоудсмита (см. с. 129) впоследствии приведет к количественному описанию указанных явлений.

§ 3
Связанные гармонические резонаторы. Статистики волновых полей

Система связанных гармонических осцилляторов, задаваемая функцией энергии

$$H = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{f}\frac{p_k^2}{m_k^2} + Q(q) \tag{35}$$

с квадратичной формой $Q(q)$ от координат (*с числовыми* коэффициентами), по-видимому, представляет собой простейшую систему с несколькими степенями свободы. Как было установлено в главе 2, § 1 перестановочные соотношения остаются инвариантными при одновременном ортогональном преобразовании координат и импульса. Поэтому систему (35), как и в классической теории, можно перевести в систему *несвязанных* осцилляторов. В частности, колебания кристаллической решетки так же, как в классической теории, следует разлагать по *собственным колебаниям*. Каждое собственное колебание в отдельности можно рассматривать как простой линейный осциллятор (такой подход к собственным колебаниям был подробно изложен выше), объединить всю совокупность несвязанных осцилляторов в одну систему позволяет метод, сущность которого нетрудно уяснить из главы 2, § 1. Тот же подход остается в силе и при переходе к предельному случаю системы с бесконечно большим числом степеней свободы, когда мы рассматриваем колебания сплошной среды, служащей идеализацией упругого тела или *полости с электромагнитным* излучением.

В прежней квантовой теории колебания полости с электромагнитным излучением часто служили предметом подробных исследований. Объясняется это тем, что с одной стороны речь идет о простейшей, доступной традиционным методам

задаче о гармоническом осцилляторе, а с другой стороны известный результат, согласно которому энергия любого собственного колебания должна быть целым кратным величины $h\nu$, указывает на формальную аналогию с формулами квантовой теории света. Последнее обстоятельство позволяет надеяться на то, что рассмотрение электромагнитного излучения в полости позволит постичь сущность квантов света. Впрочем, заранее ясно, что описанный выше подход к решению проблемы квантов света не может считаться обоснованным с наиболее существенной стороны этой проблемы, а именно: со стороны явления связи удаленных атомов. Именно поэтому проблема квантов света вообще не входит в рассматриваемый нами круг вопросов, связанных с колебаниями полости. Тем не менее между собственными колебаниями полости и некогда постулированными квантами света установлена столь тесная взаимосвязь, что каждой *статистике* собственных колебаний полости соответствует вполне определенная *статистика* квантов света и наоборот.

Дебай[24] предпринял попытку установить такую статистику, распределяя отдельные кванты света по собственным колебаниям полости, при этом ему удалось вывести формулу Планка. Однако нам кажется, что смешение теоретико-волновых представлений и представлений о квантах света не отвечает существу задачи. Более того, мы считаем, что было бы последовательно полностью отделить теоретико-волновую сторону проблемы от теории квантов света, т. е. рассматривать теоретико-волновую статистику излучения в полости с точки зрения общих статистических закономерностей, выполняющихся, например, в квантовотеоретической атомной системе. Соответствующей статистикой квантов света в этом случае, как мы покажем, является статистика Бозе[25]. Этот вывод нельзя считать неестественным, поскольку статистика здесь не имеет отношения к гипотезе независимых квантов света, а должна быть рассматриваема как экстраполяция статистики собственных колебаний. Полученный результат свидетельствует лишь о том, что гипотеза о статистически независимых корпускулах света не соответствовала бы действительности.

Рассмотрение электромагнитного излучения в полости в рамках прежней квантовой теории наталкивалось на принципиальную трудность: приводя к формуле излучения Планка, старая теория не давала правильного среднего значения квадрата флуктуаций энергии в части пространства. Таким образом, последовательное рассмотрение собственных колебаний механической системы или электромагнитных колебаний в полости в рамках старой теории приводит к тягчайшим противоречиям. Поэтому мы питали надежду, что модифицированная кинематика, лежащая в основе предлагаемой нами теории, даст правильное значение для интерферирующих флуктуаций, вследствие чего указанные выше противоречия отпадут, и соответствующая статистика излучения в полости окажется вполне приемлемой.

Состояния системы осцилляторов можно охарактеризовать «квантовыми числами» $n_1, n_2, n_3, \ldots$ отдельных осцилляторов так, что энергии отдельных состояний с точностью до аддитивной постоянной будут определяться выражением

$$E_n = h \sum_k \nu_k n_k. \tag{36}$$

Аддитивная постоянная — «нулевая энергия» — равна

$$C = \frac{1}{2} h \sum_k \nu_k$$

[24] *Debye P.* Ann. Phys., 1910, **33**, 1427; см. также *Ehrenfest P.* Zs. Phys., 1906, **7**, 528.

[25] *Bose S. N.* Zs. Phys., 1924, **26**, 178.

(в предельном случае бесконечно большого числа степеней свободы постоянная C была бы бесконечно велика). Для краткости мы будем в дальнейшем называть величины E_n из (36) *тепловой энергией*. Как показано в части I, всем состояниям системы, характеризуемым определенным набором значений $n_1, n_2, n_3, \ldots$, следует приписать равные статистические веса. Вытекающие отсюда выводы становятся легко обозримыми, если заметить следующее.

Если в некоторой части s-мерного изотропного пространства объемом $V = l^s$ волны распространяются с фазовой скоростью v, то число *собственных колебаний* для интервала частот $d\nu$ равно числу *«ячеек»* в смысле Бозе—Эйнштейна для $d\nu$. Это утверждение справедливо при любом s, в том числе для колеблющихся *мембран* или *струн*. Действительно, если отвлечься от поляризационных свойств и т.д., то число собственных колебаний для диапазона частот $d\nu$ зависит от ответа на вопрос, сколькими способами можно выбрать целые положительные числа $m_1, \ldots, m_s$ так, чтобы частота ν, определяемая из соотношения

$$\frac{2l}{v}\nu = \sqrt{m_1^2 + \ldots + m_s^2},$$

лежала в определенном интервале $d\nu$. Если $K_s(a)$ — объем s-мерного шара радиуса a, то существует $\frac{V}{v^s}K_s(\nu)$ собственных колебаний с частотой меньше ν. С другой стороны, число ячеек в интервале $d\nu$ можно определить следующим образом. Компоненты импульса $p_1, \ldots, p_s$ квантов удовлетворяют соотношению

$$\frac{h\nu}{v} = \sqrt{p_1^2 + \ldots + p_s^2},$$

а величина ячеек в $2s$-мерном фазовом пространстве составляет h^s. Отсюда мы заключаем, что число ячеек, соответствующих частотам меньше ν, равно $\frac{V}{v^s}K_s(\nu)$.

Как упоминалось выше, обратное однозначное соответствие, сопоставляющее ячейки собственным колебаниям, можно установить так, что любая пара всегда будет принадлежать одному интервалу $d\nu$. Соответствие между ячейками и собственными колебаниями можно установить и так, что направления собственного колебания и квантов света сопоставленной колебанию ячейки попадают в одну бесконечно малую угловую область. Как видно из соотношения (36), число квантов одного *осциллятора* следует положить равным числу *квантов в соответствующей ячейке*. Каждая статистика квантов света порождает присущую лишь ей статистику собственных колебаний и наоборот. Таким образом, приведенное выше утверждение относительно статистических весов состояний системы осцилляторов при указанном соответствии переходит непосредственно в основное предположение статистики Бозе—Эйнштейна. Равновероятные комплексы определяются тем, что известно, сколько квантов находятся в каждой ячейке[26].

По статистике Дебая, число осцилляторов, обладающих r квантами (с точностью до множителя, зависящего только от ν), равно

$$\frac{1}{r}e^{-r\frac{h\nu}{kT}}, \tag{37}$$

формулу Планка мы получим, выбрав это число равным

$$\sum_{r=1}^{\infty} e^{-r\frac{h\nu}{kT}} = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

[26] *Einstein A.* Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., 1925. S. 3. Разумеется наши соображения не дают ничего нового для обоснования гипотезы Эйнштейна, согласно которой эта форма статистики применима и к идеальному газу.

К сожалению, выражение (37) справедливо лишь при $r > 0$ и не дает числа осцилляторов, обладающих нулевым количеством квантов. Согласно новым воззрениям, вместо выражения (37) следует взять выражение

$$\left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right) e^{-r\frac{h\nu}{kT}}, \tag{38}$$

предложенное Бозе[27], которое на языке теории квантов света задает число «r-кратно занятых ячеек». Формула Планка следует из суммы

$$\sum_{r=0}^{\infty} r\left(1 - e^{\frac{h\nu}{kT}}\right) e^{-r\frac{h\nu}{kT}} = \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}.$$

Статистика квантов света, соответствующая статистике колебаний Дебая, представлена теорией, разработанной Вольфке[28] и Боте[29]. Правда, эти авторы предпочитают говорить не о r-кратно занятых ячейках, а называть выражение (37) числом «r-квантовых молекул из световых квантов». Упомянутый недостаток классической волновой теории, как известно, проявляется при исследовании флуктуаций энергии в поле излучения. Если объем V сообщается с очень большим объемом так, что волны, лежащие в узком интервале частот ν, $d\nu+\nu$, могут беспрепятственно распространяться из одного объема в другой, в то время как все остальные волны остаются в пределах соответствующих объемов, и E — энергия волн с частотой ν в объеме V, то, как показал Эйнштейн, обращение принципа Больмана позволяет вычислить квадрат флуктуации $\overline{\Delta^2} = \overline{(E - \overline{E})^2}$. Если $z_\nu d\nu$ — число собственных колебаний (ячеек) с частотой из интервала $d\nu$, приходящихся на единицу объема, так что

$$\overline{E} = \frac{z_\nu h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} v, \tag{39}$$

то

$$\overline{\Delta^2} = h\nu\overline{E} + \frac{\overline{E}^2}{z_\nu V}. \tag{40}$$

Если же флуктуации энергии вычислить по интерференции в волновом поле, то, как показали подробные расчеты, проведенные Лоренцом[30], классическая теория дает лишь второе слагаемое в правой части (40). Это противоречие носит совершенно общий характер и возникает также, например, при рассмотрении волн в кристаллической решетке или в упругой сплошной среде. Эренфест[31] усматривает причину противоречия в том, что соображения Эйнштейна основаны на допущении от *аддитивности энтропий* объема V и большого объема. Однако согласно классической теории собственных колебаний аддитивность энтропий имеет место лишь

[27] Это выражение применимо также, например, к описанию упругих волн в сплошной среде, если определенным образом модифицировать предложенную Шредингером (*Schrödinger E.* Zs. Phys., 1924, **25**, 89) теорию теплового равновесия между световым и звуковым излучением. Надлежащие изменения нетрудно внести по аналогии с опубликованным ранее (*Jordan P.* Zs. Phys., 1925, **33**, 649) вероятностным подходом к теории эффекта Комптона в рамках эйнштейновской теории газов.

[28] *Wolfke M.* Zs. Phys., 1921, **22**, 375.

[29] *Bothe W.* Zs. Phys., 1923, **20**, 145; 1924, **23**, 214.

[30] *Lorentz H.A.* Les Théories Statistiques en Thermodinamique. Leipzig, 1916. P. 59.

[31] *Эренфест П.* Доклад на геттингенском семинаре по строению материи летом 1925 г. (*Ehrenfest P.* Zs. Phys., 1925, **34**, 362). Содержание этого доклада оказалось весьма полезным для нашей работы.

в той области, где справедлив закон Рэлея—Джинса. Именно в отсутствии статистической независимости частотных объемов в общем случае мы видим основной недостаток прежней теории излучения в полости, делающий ее неприменимой даже к простейшей задаче с гармоническим осциллятором.

Вычислим теперь квадрат флуктуации $\overline{\Delta^2}$ из интерференции на основе квантовомеханических соображений. Чтобы не загромождать вычисления лишними деталями, не относящимися к существу дела, рассмотрим простейший случай, а именно: натянутую *колеблющуюся струну*. Все наиболее существенные особенности вычислений непосредственно переносятся и на более общие случаи. Сначала мы будем придерживаться классического подхода.

Пусть l — длина струны, $u(x,t)$ — амплитуда поперечного колебания. Вводя коэффициенты Фурье $q_k(t)$, задаваемые соотношениями

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} q_k(t) \sin k\frac{\pi}{l}x, \tag{41}$$

или

$$q_k(t) = \frac{2}{l}\int_0^l u(x,t) \sin k\frac{\pi}{l}x\,dx, \tag{41'}$$

как координаты, запишем энергию струны в виде суммы квадратов. При подходящем выборе единиц имеем:

$$H = \frac{1}{2}\int_0^l \left\{u^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right\} dx = \frac{l}{4}\sum_{k=1}^{\infty}\left\{\dot q_k(t) + \left(k\frac{\pi}{l}\right)^2 q_k(t)^2\right\}. \tag{42}$$

Энергия E отрезка струны $(0, a)$ определяется более общим выражением

$$E = \frac{1}{2}\int_0^a \sum_{j,k=1}^{\infty}\left\{\dot q_j \dot q_k \sin j\frac{\pi}{l}x \sin k\frac{\pi}{l}x + q_j q_k jk\left(\frac{\pi}{l}\right)^2 \cos j\frac{\pi}{l}x \cos k\frac{\pi}{l}x\right\} dx. \tag{43}$$

Удерживая в (43) только члены с $j = k$, получаем в предположении, что все длины волн малы по сравнению с a, значение $\frac{a}{lH}$. Нетрудно видеть, что разность

$$\Delta = E - \overline{E},$$

где черта сверху означает усреднение по фазам φ_k в

$$q_k = a_k \cos(w_k t + \varphi_k), \quad w_k = k\frac{\pi}{l}, \tag{44}$$

получается из (43), если отбросить все слагаемые с $j = k$. Это среднее по фазе совпадает со средним по времени. Интегрируя, получаем:

$$\Delta = \frac{1}{4}\sum_{\substack{j,k=1,\\ j\neq k}}^{\infty}\left\{\dot q_j \dot q_k K_{jk} + jk q_j q_k \left(\frac{\pi}{l}\right)^2 K'_{jk}\right\}, \tag{45}$$

где

$$K_{ij} = \frac{\sin(j-k)\frac{\pi}{l}a}{(j-k)\frac{\pi}{l}} - \frac{\sin(j+k)\frac{\pi}{l}a}{(j+k)\frac{\pi}{l}} = \frac{\sin(w_j - w_k)a}{w_j - w_k} - \frac{\sin(w_j + w_k)a}{w_j + w_k},$$
$$K'_{ij} = \frac{\sin(j-k)\frac{\pi}{l}a}{(j-k)\frac{\pi}{l}} + \frac{\sin(j+k)\frac{\pi}{l}a}{(j+k)\frac{\pi}{l}} = \frac{\sin(w_j - w_k)a}{(w_j - w_k)} + \frac{\sin(w_j + w_k)a}{w_j + w_k}. \qquad (45')$$

Квадрат флуктуации $\overline{\Delta^2}$ понадобиться нам в дальнейшем для квантовомеханических расчетов, поэтому мы выпишем его подробно. Имеем:

$$\Delta^2 = (\Delta_1 + \Delta_2)^2 = \Delta_1^2 + \Delta_2^2 + \Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1, \qquad (46)$$

где

$$\Delta_1^2\Delta_2^2 + \Delta_2\Delta_1 = \frac{1}{16}\sum_{\substack{j,k=1,\\ j\neq k}}^{\infty}\sum_{\substack{i,\varkappa=1,\\ i\neq\varkappa}}^{\infty}\left\{\dot q_j\dot q_k\dot q_i\dot q_\varkappa K_{ij}K_{i\varkappa} + jki\varkappa\left(\frac{\pi}{l}\right)^4 q_jq_kq_iq_\varkappa K'_{jk}K'_{i\varkappa}\right\}, \qquad (46')$$

$$\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1 = \frac{1}{16}\sum_{\substack{j,k=1,\\ j\neq k}}^{\infty}\sum_{\substack{i,\varkappa=1,\\ i\neq\varkappa}}^{\infty}\left\{jkq_jq_k\dot q_i\dot q_\varkappa K'_{ij}K'_{i\varkappa} + i\varkappa\dot q_j\dot q_kq_iq_\varkappa K_{jk}K'_{i\varkappa}\right\}. \qquad (46'')$$

Из (44) следует, что $\overline{\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1} = 0$, и

$$\overline{\Delta^2} = \overline{\Delta_1^2} + \overline{\Delta_2^2} = \frac{1}{8}\sum_{j,k=1}^{\infty}\left\{\overline{\dot q_j^2\dot q_k^2}K_{jk}^2 + j^2k^2\left(\frac{\pi}{l}\right)^4\overline{q_j^2q_k^2}K'^2_{jk}\right\}. \qquad (47)$$

Если длина струны l возрастает, то значения w_k, как видно из (44) , сгущаются, и сумма (47) переходит в интервал

$$\overline{\Delta^2} = \overline{\Delta_1^2} + \overline{\Delta_2^2} = \frac{1}{8}\int_0^{\infty}\int_0^{\infty} dw_j\, dw_k \frac{l^2}{\pi^2}\left\{\overline{\dot q_j^2\dot q_k^2}K_{jk}^2 + j^2k^2\left(\frac{\pi}{l}\right)^4\overline{q_j^2q_k^2}K'^2_{jk}\right\}. \qquad (47')$$

Наконец, предположим, что «объем» a очень велик и воспользуемся соотношением

$$\lim_{a\to\infty}\frac{1}{a}\int_{-\Omega}^{\Omega'}\frac{\sin^2 w\alpha}{w^2}f(w)dw = \pi f(0) \quad \text{при} \quad \Omega, \Omega' > 0. \qquad (48)$$

Нетрудно видеть, что вклад дают лишь первые слагаемые

$$\frac{\sin(w_j - w_k)a}{(w_j - w_k)}$$

в (45), а соотношение (47) переходит в

$$\overline{\Delta^2} = \frac{al}{8\pi}\int_0^{\infty} dw\left\{\left(\overline{\dot q_w^2}\right)^2 + \left(w^2\overline{q_w^2}\right)^2\right\}. \qquad (49)$$

С другой стороны, как следует из выражения (42), средняя энергия в объеме a составляет

$$\bar{E} = \frac{a}{l}\frac{l}{4}\int_0^\infty dw\frac{l}{\pi}\left\{\overline{\dot{q}_w^2} + w^2\overline{q_w^2}\right\} = \frac{al}{4\pi}\int_0^\infty dw\{\overline{\dot{q}_w^2} + w^2\overline{d^2}\}. \tag{50}$$

При этом выполняется соотношение

$$\overline{\dot{q}_w^2} = w^2\overline{q_w^2}. \tag{51}$$

Подчеркнем, что оно, как показано в главе 1, остается в силе и в квантовой механике. Чтобы перейти к величинам $\overline{\Delta^2}$, $\bar{E}$, фигурирующим в (39), (40), необходимо взять доли (49) и (50), приходящиеся на $d\nu = dw/2\pi$, и разделить их на $d\nu$. При $v = a$ получаем

$$\overline{\Delta^2} = \frac{\bar{E}^2}{2v}. \tag{52}$$

Из (44) мы заключаем, что в нашем случае $z_\nu = 2$. Тогда

$$dw_k = 2\pi d\nu_k = \frac{\pi}{l}dk.$$

Итак, равенство (52) дает второй член в соотношении (40).

При переходе к квантовой механике соотношения (41), (41′) (42), (43) следует рассматривать как матричные уравнения для u, H, q, E. Однако x остается числом: если вместо сплошной струны мы рассмотрим ряд упруго связанных *материальных точек*, то x будет означать (умноженный на постоянную решетки) *номер* точки.

Матрица q_k имеет размеры $2f \times 2f$, где f — число собственных колебаний. Следовательно, для упругой струны матрица q_k бесконечномерна. Все элементы $q_k(n, m)$ матрицы q_k, кроме тех, для которых

$$\begin{aligned} n_j - m_j &= 0 \quad \text{при} \quad j \neq k, \\ n_k - m_k &= \pm 1, \end{aligned} \tag{53}$$

равны нулю. Среднее по фазе от матрицы q_k — диагональная матрица, совпадающая с исходной матрицей, в которой все элементы, кроме стоящих на главной диагонали, обращены в нуль. Из соотношений (53) можно вывести следствия, отчасти аналогичные полученным нами из соотношений (44). Соображения, позволившие получить соотношения (46), (46′), (46″), остаются в силе и в квантовой механике. Для диагональной матрицы $\overline{\Delta_1^2 + \Delta_2^2}$ сохраняются формулы (47), (47′) с матрицами q_k. Наконец, если ту часть величины $\overline{\Delta^2}$, которая соответствует определенной частоте ν, обозначить через $\overline{\Delta^2}$, то получится соотношение

$$\overline{\Delta_1^2 + \Delta_2^2} = \frac{\bar{E}^{*2}}{2v}, \tag{52′}$$

аналогичное соотношению (52). Как показывают соотношения (49), (50) и (51), E^* не является более средней тепловой энергией, а суммой *тепловой энергии* и *нулевой энергии*. Элементарные формулы для осцилляторов дают следующее значение величины E^*:

$$\begin{aligned} \bar{E}^* &= h\nu v + \bar{E}, \\ \overline{\Delta_1^2 + \Delta_2^2} &= \frac{1}{2}(h\nu)^2 v + h\nu\bar{E} + \frac{\bar{E}^2}{2v} \end{aligned} \tag{54}$$

(нулевая энергия для интервала $d\nu$ составляет

$$\frac{v}{l}\frac{h\nu}{2}lz_\nu d\nu = h\nu V d\nu).$$

Остается рассмотреть величину $\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1$. Поскольку вычисляется она так же, как $\overline{\Delta_1^2 + \Delta_2^2}$, мы по формуле (49) получаем выражение

$$\overline{\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1} = \frac{al^2}{8\pi}\int\limits_0^\infty dww^2\left\{(q_w\dot{q}_w)^2 + (\dot{q}_w q_w)^2\right\}.$$

Из перестановочных соотношений с учетом формулы (42) следует, что величину $l/2$ надлежит рассматривать как «массу» резонаторов:

$$-q_j\dot{q}_j(n,n) = \dot{q}_j q_j(n,n) = \frac{1}{2}\frac{2}{l}\frac{h}{2\pi i} = \frac{h}{2l\pi i}.$$

Таким образом, соответствующая интервалу частот $d\nu$ составляющая $\overline{\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1}$ выражения $\overline{\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1}$ после деления на $d\nu$ составляет

$$\overline{\Delta_1\Delta_2 + \Delta_2\Delta_1} = -\frac{1}{2}(h\nu)^2 V,$$

откуда, принимая во внимание равенство (54), получаем в полном соответствии с (40):

$$\overline{\Delta^2} = h\nu\overline{E} + \frac{\overline{E}^2}{z_\nu V}. \qquad (55)$$

Если учесть, что рассмотренные здесь вопросы весьма далеки от проблем, от которых берут начало исследования по квантовой механике, то достигнутый результат (соотношение (55)) следует считать весьма обнадеживающим для дальнейшего развития теории.

Результат Эренфеста показывает, что при вычислении флуктуаций энергии можно было бы исходить не из представлений об интерференции волнового поля, и вместе с тем дает уверенность в возможности других, аналогичных постановок проблем, не приводящих к противоречиям, если бы удалось найти прямое доказательство аддитивности энтропий частичных объемов в квантовой механике волновых полей. Полученный нами результат позволяет предполагать, что аддитивность действительно имеет место в общем случае.

Причина появления в (55) членов, не возникающих в классической теории, тесно связаны с причинами появления «нулевой энергии». В обоих случаях принципиальное отличие предлагаемой нами теории от существовавшей ранее заключается не в различии законов механики, а в характерной для этой теории кинематике. Наглядным примеров различия между квантовотеоретической и традиционной кинематикой может служить формула (55), в которую вообще не входят принципы механики.

Если бы предлагаемая нами квантовая механика оказалась верной в наиболее важных пунктах, то из совершенно общих соображений ее наиболее значительным достижением можно было считать следующее. В нашей теории кинематика и механика снова приведены в столь тесную взаимосвязь, какая существует между кинематикой и механикой в классической теории. Принципиально новая точка зрения на механические понятия и понятия пространства и времени, вытекающая из основных постулатов квантовой теории, находит адекватное выражение в кинематике и в механике, а также во взаимосвязи кинематики и механики.

ЗАДАЧА МНОГИХ ТЕЛ И РЕЗОНАНС В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ*

В работе делается попытка заложить основы квантовомеханического рассмотрения задачи многих тел. В этих целях подробно исследуется явление резонанса, характерное для квантовой механики задачи многих тел, и устанавливается связь полученных здесь результатов со статистикой Эйнштейна—Бозе и принципом запрета Паули для эквивалентных орбит.

Квантовая механика до сих пор применялась только к системам, состоящим из одной частицы. В этом ограничении были повинны прежде всего математические трудности, стоявшие на пути вычислений отдельных элементов амплитуд. В последнее время гигантский процесс в этой области был достигнут Шредингером[1], основоположные исследования которого, исходившие из волновой теории материи де Бройля[2], открыли новый, математически значительно более удобный подход к квантовой механике. Подобно тому, как в свое время Гамильтон вскрыл большое формальное сходство между классической механикой и геометрической оптикой в многомерных пространствах и построил на его основе самый действенный математический аппарат для решения задач классической механики, Шредингер указал на большое формальное сходство квантовой механики с волновой оптикой в многомерных пространствах, которое и здесь приводит к наиболее действенному математическому аппарату для решения квантовомеханических задач. Для системы с f степенями свободы Шредингер заменяет квантовомеханическую проблему задачей на собственные значения в пространстве f измерений; энергии стационарных состояний оказываются собственными значениями задачи; матричные элементы предстают в виде коэффициентов разложения в ряд по собственным функциям; если собственные функции найдены, то амплитуды перехода определяются простыми квадратурами. Однако в физической интерпретации математического формального аппарата точка зрения Шредингера отличается от нашей. Правда, ввиду математической эквивалентности теории Шредингера и квантовой механики вопрос о физической сущности, лежащей в основе уравнений, временно можно было бы считать вопросом целесообразности, относящимся к сфере наших взглядов; но только до тех пор, пока мы не попытаемся расширить фундамент этой квантовой теории, основываясь на избранных когда-то наглядных представлениях. Поясним это на частном примере. Для рассматриваемых здесь задач многих тел мы хотели бы потребовать прямого примыкания к точке зрения, лежащей в основе квантовой механики, в то время как Шредингер[3] допускает возможность внесения в существовавшие до сих пор уравнения существенных изменений.

---

* Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik. — Zs. Phys., 1926, **38**, 411–426. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Schrödinger E.* Ann. Phys., 1926, **79**, 361, 489, 734.

[2] *Broglie L. de.* Ann. Phys., 1925, **3**, 22.

[3] См. *Schrödinger E.* Ann. Phys., 1926, **79**, примечание на с. 750.

Но, даже ограничиваясь обсуждением вопроса о взглядах, я думаю, что имеются случаи, когда волновые представления кажутся более натянутыми, чем наглядные представления о движении частиц в пространствах с неклассической кинематикой. Возьмем, например, представление о вращающемся электроне. Насколько я могу видеть, теорию Шредингера нельзя признать и последовательной волновой теорией материи в духе де Бройля. Переход к пространству f измерений и вычисление скорости волн из потенциальной энергии взаимодействия частиц представляют собой заимствование из понятий корпускулярной теории. Если бы даже удалось построить последовательную волновую теорию в обыкновенном трехмерном пространстве в соответствии с программой де Бройля и Эйнштейна, то это едва ли привело бы к исчерпывающему описанию атомистических явлений в наших обычных пространственно-временных понятиях. Ведь, принимая во внимание все более явственную аналогию между светом и материей, следует думать, что такая волновая теория материи могла бы дать полное описание наших атомистических явлений не в большей степени, чем волновая теория света объясняет оптические явления. Ввиду этой аналогии мне кажется, что одна из важнейших сторон квантовой механики состоит в том, что она базируется на корпускулярном представлении о материи; при этом, конечно, речь не идет об описании движений корпускул в наших обычных пространственно-временных понятиях. Этого едва ли можно было бы и ожидать; ибо, если корпускулы и оказались бы сингулярностями метрической структуры пространства, как того желают континуальные теории, то это, вероятно, не было бы описанием в наших обычных пространственно-временных понятиях — дело обстояло бы примерно так, как при сопоставлении пространства с метрикой, существенно отклоняющейся от евклидовой, с «обыкновенными» пространствами.

Однако мы не будем больше обсуждать физические трудности, которые при теперешнем состоянии теории не могут быть разрешены. Мы удовлетворимся констатацией того, что теория Шредингера и квантовая механика взаимно дополняют друг друга, как в математическом отношении, так и в создании наглядных картин и аналогий, которые дают нам возможность глубже, чем прежде, проникать в физическую сущность процессов в очень малых областях пространства.

Цель настоящего исследования заключается в квантовомеханическом рассмотрении систем, состоящих из многих материальных точек. На первый взгляд такое рассмотрение как будто наталкивается на значительные трудности. Черты волновой теории де Бройля, ведущие к статистике Эйнштейна—Бозе[4)], по-видимому, не имеют аналога в квантовой механике; дополнительные правила, например, запрет Паули для эквивалентных орбит[5)], в этой форме не находят места в математической схеме квантовой механики. Таким образом, можно было бы думать о несостоятельности квантовой механики в проблеме эквивалентных орбит. Наконец, следует напомнить и об известной трудности при количественном объяснении спектров: расстояние между синглетной и триплетной системами в спектрах щелочноземельных металлах и в спектре гелия на порядки величины больше простой разницы в энергии магнитного взаимодействия двух вращающихся электронов, с которой его можно было бы отождествить.

Цель следующих ниже рассуждений состоит в более точном анализе высказываний, которые можно делать при последовательном применении квантовой механики к задаче многих тел. Сообщим результат заранее: обе упомянутых выше трудности

[4)] *Bose S. N.* Zs. Phys., 1924, **26**, 178. Интересующее нас применение этой статистики к материальным частицам дано *А. Эйнштейном* (*Einstein A.* Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., 1924, 261; 1925, 3, 18. — Русский перевод: *Эйнштейн А.* Собрание научных трудов. Т. 3. М.: Наука, 1966. С. 481, 489, 503).

[5)] *Pauli W.* Zs. Phys., 1925, **31**, 765. — Русский перевод: *Паули В.* Труды по квантовой теории. Статьи 1920–1928. М.: Наука, 1975. С. 645.

при этом анализе разрешаются сами собой, и оказывается возможным установить связь между статистикой Бозе—Эйнштейна и квантовой механикой.

§1

Простейшая из мыслимых задач многих тел касается системы двух связанных осцилляторов. Как известно, такую задачу, если только энергия взаимодействия имеет вид квадратичной функции координат, всегда можно свести к задаче о двух несвязанных осцилляторов. Можно не сомневаться в том, что последняя задача может быть решена квантовой механикой без новых предположений, следовательно, тем самым будет решена и первая задача. В то же время этот пример обладает всеми характерными свойствами квантовомеханических задач многих тел, и более точный анализ этой простой модели уже позволяет получить все результаты, которые позднее будут необходимы для объяснения спектров. Пример с осцилляторами имеет еще и то преимущество, что при рассмотрении его по существу нет различия между классической механикой, существовавшей до сих пор квантовой теорией и квантовой механикой; для каждого квантовомеханического результата здесь имеется простой классико-механический аналог. Позднее, рассматривая более общие квантовомеханические системы, мы будем вынуждены в большей или меньшей мере отказываться от такого классико-механического аналога.

Характерная черта атомных систем заключается в том, что системы частиц, из которых они могут состоять, а именно электроны, одинаковы и подвержены действию одинаковых сил. Для того, чтобы воспроизвести эту черту в нашем примере, мы возьмем функцию Гамильтона в виде

$$H = \frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{m}{2}\omega^2 q_1^2 + \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m}{2}\omega^2 q_2^2 + m\lambda q_1 q_2. \quad (1)$$

Таким образом, частоты и массы двух связанных осцилляторов предполагаются одинаковыми. В формуле (1) q_1, q_2 означают координаты, p_1, p_2 — импульсы, m и ω — масса и частота осцилляторов, λ — константа взаимодействия. При известном преобразовании

$$q_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 + q_2); \quad q_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}(q_1 - q_2) \quad (2)$$

формула (1) переходит в

$$H = \frac{1}{2m}p_1'^2 + \frac{m}{2}\omega_1'^2 q_1'^2 + \frac{1}{2m}p_2'^2 + \frac{m}{2}\omega_2'^2 q_2'^2, \quad (3)$$

причем

$$\omega_1'^2 = \omega^2 + \lambda, \quad \omega_2'^2 = \omega^2 - \lambda. \quad (4)$$

Теперь H распадается аддитивно на две осцилляторных энергии, которые соответствуют «главным колебаниям». Если возбуждена только первая координата q_1', то обе частицы колеблются с одинаковой фазой в одну сторону, если же возбуждена только q_2', то они колеблются одновременно в противоположные стороны или, другими словами, с разностью фаз π (рис. 1).

$$H_{n_1',n_2'} = \frac{\omega_1'^2 h}{2\pi}\left(n_1' + \frac{1}{2}\right) + \frac{\omega_2'^2 h}{2\pi}\left(n_2' + \frac{1}{2}\right), \quad (5)$$

где n'_1 и n'_2 — целые числа. Обозначая терм символом $n'_1 n'_2$, мы приходим к схеме термов на рис. 2. На различие между $+$ и $\bullet$ на рис. 2 мы пока не будем обращать внимания.

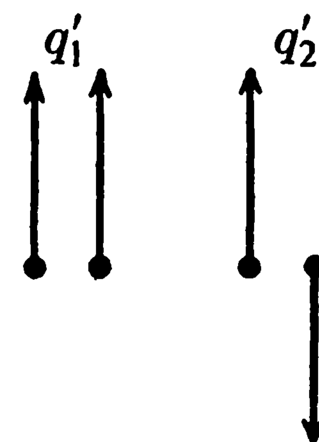


Рис. 1

Рассмотрим теперь возможные переходные процессы. С целью провести как можно более тесную аналогию с атомными системами мы предположим, что оба осциллятора состоят из заряженных частиц, которые могут колебаться вдоль одной прямой около точки, имеющей такой же по величине, но противоположный по знаку заряд. Тогда электрический дипольный момент дается в основном суммой $q_1 + q_2$. Отсюда следует, что, как это ясно прямо из рис. 1, электрический момент совершает только первое главное колебание.

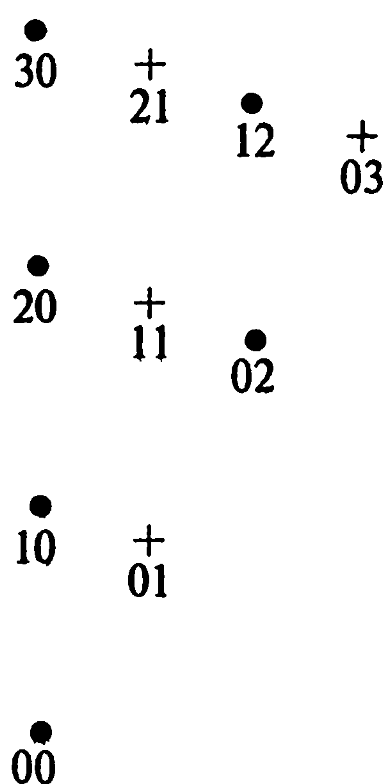


Рис. 2

Следовательно, в этом приближении происходят только переходы с изменением n'_1 на 1, т. е. на рис. 2 только переходы в вертикальном направлении. Но излучение определяется дипольным моментом только в первом приближении. Излучение меньшего порядка величины испускается также квадруполем и высшими мультиполями. Эти высшие члены в излучении выражаются через однородные симметричные функции второй, третьей и т. д. степени по q_1 и q_2 и их производным по времени. При замене q_1 и q_2 по формулам (2) на q'_1 и q'_2 возникают однородные функции второй, третьей и т. д. степени по q'_1 и q'_2, которые вследствие симметрии относительно q_1 и q_2 могут содержать координату q'_2 вместе с ее производной по времени только в четном числе сомножителей. Это значит, что и при учете всех высших приближений в излучении n'_2 всегда может изменяться только на четное число. Следовательно, схема термов на рис. 2 может быть разложена на две подсистемы ($+$ и $\bullet$) таким образом, что возможны только комбинации внутри систем $+$ или $\bullet$, но не их перекрестные комбинации. Переход из одной системы в другую невозможен даже в процессах столкновения, так как вероятность перехода при столкновении может быть представлена в виде комбинации возбуждений всех моментов (дипольных, квадрупольных и т. д.). Но отсутствие перекрестных комбинаций жестко связано с первоначальным тождеством связанных осцилляторов. Если бы оба осциллятора немного различались по массе или частоте, то появились бы перекрестные комбинации, относительная интенсивность которых определялась бы как раз этим (относительным) различием. Но вернемся теперь к первоначальному предположению о тождестве осцилляторов. Тогда ввиду указанного отсутствия перекрестных комбинаций возникает неопределенность, характерная для квантовомеханического рассмотрения проблемы. Реализуются в природе обе системы термов $+$ и $\bullet$, или же только одна из систем: $+$ либо $\bullet$? Ведь от квантовомеханического решения проблемы требуется лишь, чтобы соответствующая ему схема термов была «замкнутой», т. е. чтобы она содержала все термы, но только такие, какие могут комбинироваться между собой, так что все вероятности перехода для отсутствующих термов исчезают. Следовательно, решение квантовомеханической задачи (1) дается как системой термов; так и системой $+$, а равно и комбинацией обеих систем. Эта неопределенность квантовомеханического решения представляется мне самым существенным результатом данного исследования. Она оставляет нам свободу, как раз достаточную для того, чтобы можно было естественным образом включить в систему квантовой механики требования статистики Бозе—Эйнштейна и запрет Паули для эквивалентных орбит. Прежде более детального исследования этой ситуации я хочу подчеркнуть, что в квантовой механике связанные системы всегда ведут себя аналогично тому, как показано на только что разъясненном примере.

§2

В классической теории две периодически колеблющиеся системы входят в собственный резонанс только в том случае, когда частота отдельной подсистемы не зависит от энергии системы и примерно одинакова у обеих подсистем. В этом смысле о резонансе можно говорить для гармонических осцилляторов. В квантовой механике — в согласии с наиболее общим опытом — две атомные системы вступают в резонанс только тогда, когда частота поглощения одной системы совпадает с частотой испускания другой или наоборот; следовательно, в силу свойства линейности, внутренне присущего квантовомеханическим уравнениям, явление резонанса в квантовой механике имеет значительно более общий характер, чем в классической теории.

Для дальнейшего исследования мы возьмем две совершенно одинаковые системы a и b, имеющие по f степеней свободы и связанные энергией взаимодействия λH^1, симметричной по отношению к обеим системам. Отдельные системы a и b не должны быть вырожденными. Энергии их стационарных состояний пусть будут соответственно H_n^a и H_m^b.

Если объединить две системы в одну и сначала не учитывать взаимодействие, то полная энергия стационарного состояния «n, m» определяется формулой

$$H_{nm} = H_n^a + H_m^b. \tag{6}$$

Но объединенная система обладает характерным для резонанса свойством вырожденности: вследствие равенства

$$H_{nm} = H_{mn} \tag{7}$$

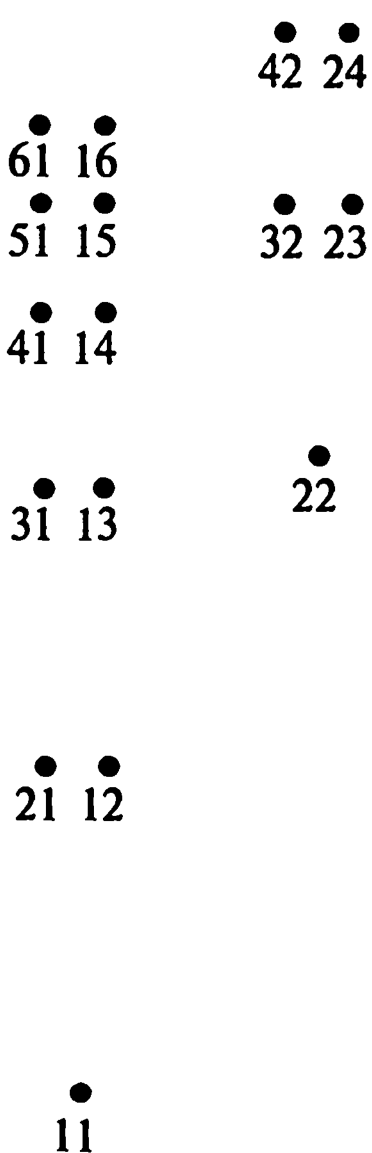


Рис. 3

каждое собственное значение оказывается двойным, за исключением собственных значений, для которых $n = m$. Другими словами: резонанс наступает всегда в тех случаях, когда обе системы первоначально находились не в одинаковых состояниях; тогда при перестановке обеих систем энергия остается той же самой; только при эквивалентных состояниях подсистем резонанс (или вырождение) исчезает. Примерная схема возникающих таким образом спектральных термов представлена на рис. 3. В системе, возмущенной взаимодействием, вырождение снимается. Возникает вековое дрожание, при котором энергия пульсирует от одной подсистемы к другой. Формально дело обстоит так: добавочная энергия W^1 возмущенной системы в первом приближении равна среднему по времени значению H^1, взятому по невозмущенному движению. Это среднее значение содержит в общем случае также члены, отвечающие переходам, при которых системы a и b взаимно переставляются местами. Поэтому следует совершить каноническое преобразование, при котором W^1 становится диагональной матрицей. Вычисление опубликовано в работе[6] «Квантовая механика II». Каноническое преобразование должно иметь вид

$$\mathbf{W}^1 = \mathbf{S}^{-1}\overline{\mathbf{H}^1}\mathbf{S}, \tag{8}$$

$$\mathbf{q}' = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{q}\mathbf{S}. \tag{9}$$

[6] *Heisenberg W., Jordan P.* Zs. Phys., 1926, **35**, 557.

Здесь $\mathbf{S}$ — матрица, которая, как и $\overline{\mathbf{H}^1}$, содержит только диагональные члены и члены, отвечающие переходам между состояниями с равными энергиями. Для невырожденных состояний диагональные члены равны 1. Теперь надо решить два линейных уравнения с двумя неизвестными $S_n m$, $S_m n$

$$\begin{aligned} W^1 S_{nm} - H^1(nm, nm) S_{nm} - H^1(nm, nm) S_{mn} = 0, \\ -H^1(mn, mn) S_{nm} + W^1 S_{mn} - H^1(mn, mn) S_{mn} = 0. \end{aligned} \tag{10}$$

При этом вследствие симметрии H^1 относительно систем a и b имеем

$$H^1(nm, nm) = H^1(mn, mn), \quad H^1(nm, mn) = H^1(mn, nm). \tag{11}$$

Два решения для W, получаемые из системы (10) путем приравнивания детерминанта нулю, целесообразно опять обозначить через nm и mn. Однако следует учитывать, что эти числа соответствуют здесь квантовым числам главных колебаний n', введенным в § 1, и не характеризуют состояния отдельных подсистем. Теперь, обе подсистемы в каждом состоянии совершают одинаковое движение (с различной фазой). Решения системы (10) с учетом (11) гласят

$$\begin{aligned} W'_{nm} &= H^1(nm, nm) + H^1(nm, mn), & S_{nm,nm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & S_{mn,nm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}. \\ W^1_{mn} &= H^1(nm, nm) - H^1(nm, mn), & S_{nm,mn} &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & S_{mn,mn} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{12}$$

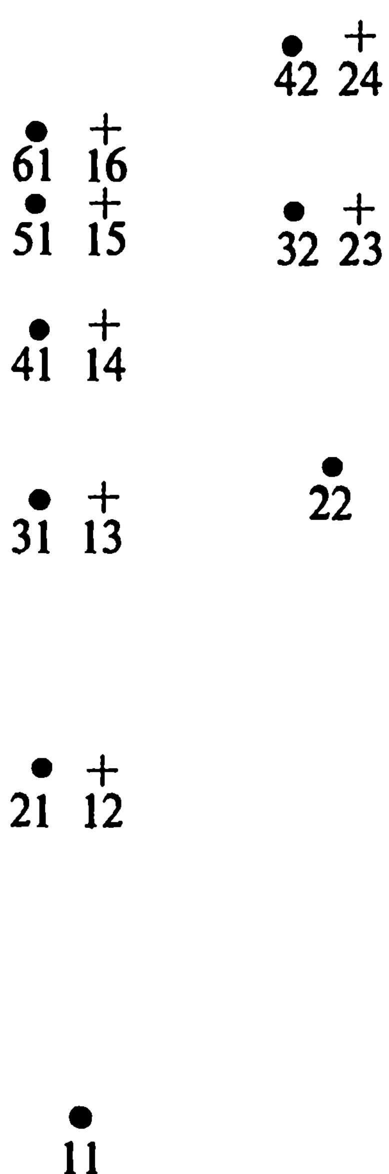


Рис. 4

Влияние связи заключается прежде всего в том, что все значения энергии становятся различными. Схема спектральных термов теперь изображена на рис. 4.

Систему этих термов — это и есть решающий результат — снова можно подразделить на две последовательности термов, которые никоим образом не комбинируют между собой (+ и • на рис. 4). Действительно, излучение снова имеет вид функции $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, которая не изменяет своего значения при перестановке обеих подсистем. Пусть эта функция будет $\mathbf{f}$; тогда для ее матричных элементов после выполнения канонического преобразования (8) имеем:

$$\mathbf{f}' = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}\mathbf{S}. \tag{13}$$

Таким образом, вследствие симметрии $\mathbf{f}$ имеем:

1. Если $n_1 \neq m$, $n_2 \neq m$, $n = m_1$, $n \neq m_2$,

$$\begin{aligned} f'_{n_1m,n_2m} &= \frac{1}{2}(f_{n_1m,n_2m} + f_{mn_1,mn_2} + f_{n_1m,mn_2} + f_{mn_1,n_2m}) = \\ &= f_{n_1m,n_2m} + f_{n_1m,mn_2}, \\ f'_{nm_1,nm_2} &= \frac{1}{2}(f_{nm_1,nm_2} + f_{m_1n,m_2n} - f_{nm_1,m_2n} - f_{m_1n,nm_2}) = \\ &= f_{nm_1,nm_2} - f_{nm_1,m_2n}, \\ f'_{n_1m,mn_2} &= \frac{1}{2}(f_{n_1m,n_2m} - f_{mn_1,mn_2} + f_{mn_1,n_2m} - f_{n_1m,mn_2}) = 0, \\ f'_{nm_1,m_2n} &= \frac{1}{2}(f_{m_1n,nm_2} - f_{nm_1,nm_2} + f_{m_1n,nm_2} - f_{nm_1,m_2n}) = 0. \end{aligned} \tag{14}$$

2. Комбинации состояний, в которых подсистемы находятся в «эквивалентных состояниях»[7)], имеют вид

$$
\begin{aligned}
f'_{n_1m,mm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{n_1m,mm} + f_{mn_1,mm}) = \sqrt{2}f_{n_1m,mm},\\
f'_{mm_1,mm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(f_{m_1m,mm} - f_{mm_1,mm}) = 0.
\end{aligned} \tag{15}
$$

Следовательно, перекрестные комбинации между системами термов + и • исчезают. Внутри обеих последовательностей термов интенсивности линий в первом приближении точно такие же, как интенсивности переходов между соответствующими первоначальными термами отдельной подсистемы (a и b); ведь амплитуды типа f_{nm_1,mn_2}, отвечающие одновременным переходам двух систем, в первом приближении исчезают. Только при комбинировании с теми состояниями, которые соответствуют эквивалентным состояниям подсистем a и b, интенсивность, в соответствии с формулами (15), в одной из последовательностей термов оказывается вдвое больше, чем в первоначальной системе, а другая последовательность термов вовсе не содержит таких состояний. «Полная интенсивность», следовательно, в первом приближении при резонансе не изменяется.

Подразделение на две некомбинирующих последовательности термов не изменяется при внешних воздействиях. Очевидно, и здесь мы имеем в точности такую же ситуацию, как и в частном примере § 1. Отсутствие перекрестных комбинаций и здесь связано с тождественностью связываемых систем; как только одна система начинает отличаться от другой, перекрестные комбинации появляются. Далее, квантовомеханическое решение снова обладает неопределенностью в подчеркнутой выше степени; *полным решением задачи может быть каждая из систем + и • по отдельности, а также их комбинация.*

Представляет также интерес рассмотреть только что обрисованную проблему резонанса с точки зрения метода Шредингера. В первоначальных подсистемах предполагаются известными нормированные Шредингеровские собственные функции φ_n^a и φ_m^b, принадлежащие состояниям с энергиями H_n^a и H_m^b, соответственно. Для матричного элемента, к примеру, n_1n_2 координаты q_k^a системы, а имеем

$$
q_k^a(n_1, n_2) = \int \dots \int q_k^a \varphi_{n_1}^a \overline{\varphi_{n_2}^a}\, dq_1^a \dots dq_f^a
$$

(чертой над φ обозначается комплексно сопряженная величина). Если две системы объединить в одну, то энергии $H_{nm} = H_n^a + H_m^b$ будет принадлежать собственная функция $\varphi_n^a\varphi_m^b$. Собственные функции возмущенной системы, принадлежащие решениям уравнения (12), получаются из собственных функций невозмущенной системы путем линейного преобразования матрицы S. Следовательно, энергии W_{nm}^1 принадлежит собственная функция

$$
\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_n^a\varphi_m^b + \varphi_m^a\varphi_n^b\right), \tag{16а}
$$

а энергии W_{mn}^1 — собственная функция

$$
\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\varphi_n^a\varphi_m^b - \varphi_m^a\varphi_n^b\right). \tag{16б}
$$

[7)] Здесь и далее в работе слова «в эквивалентных состояниях» относятся к невозмущенной системе. В возмущенной же системе подсистемы совершают всегда одинаковые движения с различными фазами.

Отсутствие перекрестных комбинаций подсистем следует просто из того, что интеграл от симметричной по a и b или от симметричного оператора f вида

$$\int f\frac{1}{2}\left(\varphi_n^a\varphi_m^b+\varphi_m^a\varphi_n^b\right)\left(\overline{\varphi_n^a}\overline{\varphi_m^b}-\overline{\varphi_m^a}\overline{\varphi_n^b}\right)dq_1^a\ldots dq_f^a \tag{17}$$

меняет знак при перестановке систем a и b, но при этом все же сохраняет свою величину; значит, этот интеграл должен быть нулем.

§3

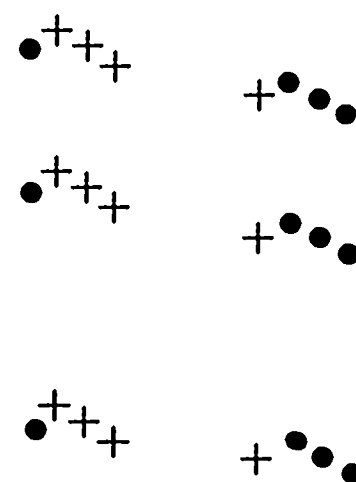
Далее в качестве примера применения изложенной выше общей теории будет вкратце рассмотрен атом гелия; к количественной стороне дела я вернусь позднее.

1. Предположим, что электроны суть точечные заряды, не имеющие магнитного и вращательного момента импульса. Тогда в отсутствие взаимодействия справедлива в основном схема рис. 3, а при наличии взаимодействия — схема рис. 4. Две системы, на которые распадаются спектральные термы, образуют пара- и ортогелий. Перекрестные комбинации между ними пока невозможны. Поскольку различие в энергии двух соответственных термов пара- и ортогелия сводится к резонансному дрожанию, вызванному кулоновскими силами отталкивания между электронами, то понятно, что в общем случае оно будет по порядку величины таким же, как и отклонение рассматриваемого терма от водородного, обусловленное экранированием. Далее, из рис. 4 следует, что $1S$-терм присутствует только в *одной* из двух систем. То обстоятельство, что эта система в общем случае должна иметь более высокие значения энергии, следует из вычислений. Вероятности перехода внутри системы орто- или парагелия в первом приближении равны соответствующим вероятностям в водороде. Только для парагелия переходы в $1S$-терм в самом грубом приближении должны происходить вдвое чаще.

Если мы захотели бы построить наглядную модель движений электронов в атоме, мало-мальски отвечающую квантовомеханическому решению, то мы должны были бы представить себе нечто вроде того, как будто оба электрона периодически непрерывным образом меняются местами, аналогично упомянутому выше обмену энергии в примере с осцилляторами, причем период такого обмена определяется в точности расстоянием терма ортогелия от соответствующего терма парагелия.

2. Представим себе электроны, в соответствии с гипотезой Комптона—Уленбека—Гоудсмита[8], в виде маленьких намагниченных волчков, которым сначала мы припишем определенное, но различное для двух электронов направление оси. Тогда схема термов на рис. 4 качественно не изменится, однако появятся слабые перекрестные комбинации ортогелия и парагелия, интенсивность которых определяется взаимодействием между магнитным моментом и орбитой. Дело в том, что теперь эти два электрона больше уже неравноправны.

3. Направим теперь магнитные моменты электронов произвольным образом. Тогда вычисление показывает, что каждый терм рассматриваемой системы расщепляется на четыре терма, в соответствии со статистическим весом магнитного момента электрона, и что схема термов, как и прежде, распадается на две полностью разделенные части; ведь теперь электроны опять равноправны. Но подразделение на системы здесь иное, чем прежде (см. рис. 5 +



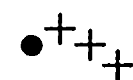


Рис. 5

[8] *Compton A. H.* Journ. Frankl. Inst., 1924, **192**, 145; *Uhlenbeck G. E., Goudsmith S.* Naturwiss., 1925, **13**, 953.

и •). Одна система содержит спектральные термы, для которых ортогелий имеет триплетный, а парагелий — синглетный спектр; вторая система содержит спектральные термы, для которых ортогелий имеет синглетный, а парагелий — триплетный спектр. Существуют перекрестные комбинации пара — и ортогелия с интенсивностью, определяемой, как в п. 2, взаимодействием между орбитой и магнитным моментом электрона. Однако перекрестные комбинации систем + и • отсутствуют. Физическую ситуацию можно кратко охарактеризовать следующим образом: между двумя электронами сначала существует грубый электрический резонанс; он нарушается магнитами, и появляются переходы из ортогелия в парагелий. Но и при учете магнитов существует более тонкий точный резонанс, приводящий к подразделению на две последовательности термов, охарактеризованные выше. О вычислениях, ведущих к изложенным выше результатам, будет сообщено в ближайшее время в отдельной работе.

§4

Для спектра гелия опыт показывает, что существует только одна система (на рис. 5), которая насколько мы можем здесь судить, согласуется со спектром гелия, по крайней мере качественно; вторая система в природе не реализуется. В этом факте, на мой взгляд, — если предполагать, что наши результаты, полученные для двух систем, можно обобщить также на случай произвольного числа систем, — и заключается непосредственная связь между подчеркнутой выше квантовомеханической неопределенностью, с одной стороны, и правилом Паули, а также статистикой Бозе—Эйнштейна — с другой. Если в природе существует только одна система (•) из двух, то это, с одной стороны, приводит к уменьшению статистических весов именно в направлении, предложенным Бозе; с другой стороны, при правильном выборе системы запрет Паули для эквивалентных орбит выполняется сам собой. Обобщение этих соображений на системы, состоящие из n одинаковых подсистем, можно поэтому провести следующим образом. В соответствии с $n!$ перестановками в каждой из n систем в отсутствие взаимодействия в общем случае существует $n!$ одинаковых значений энергии. При взаимодействии вырождение снимается, система термов вследствие резонанса расщепляется на $n!$ подсистем. Среди них имеется система, которая не содержит эквивалентных орбит и не может комбинировать с другими системами. Эта система одна только и встречается в природе, она-то и представляет действительное решение. Одновременно уменьшение статистических весов от $n!$ до 1 соответствует статистике Бозе—Эйнштейна. Однако указанная здесь формулировка этой статистики превосходит формулировку Бозе—Эйнштейна в том отношении, что она предписывает выбор из $n!$ решений вполне определенной системы, а именно той, которая не содержит эквивалентных подсистем и потому находится в согласии с запретом Паули. Обоснование тому, что только одна эта система и должна выделяться из всех возможных квантовомеханических решений, вероятно, не может быть дано путем простых квантовомеханических вычислений. Но мне представляется, что важный результат этого исследования состоит в том, что запрет Паули и статистика Эйнштейна имеют одинаковое происхождение и что они не противоречат квантовой механике. В наших рассуждениях имеет место и аналог парадокса, многократно отмечавшегося Эйнштейном: если связываемые подсистемы различаются друг от друга, то для них должна быть справедливой классическая статистика; в принципе и при бесконечно малых различиях. Несмотря на это, статистика для одинаковых систем оказывается совсем другой. Для различающихся систем в соответствии с проведенными здесь вычислениями также должна всегда оставаться в силе классическая статистика, так как между $n!$ подсистемами происходят переходы; поэтому ни одна подсистема не может быть

исключена. Но при убывающих различиях между частицами переходы становятся все реже. Если соответствующие переходам амплитуды станут меньше конечной величины, определяемой остротой рассматриваемого состояния, то существует логическая возможность совершенно исключить переходы и изменить статистику. Следует еще подчеркнуть, что согласно нашим рассуждениям необходимым условием для изменения статистики должно быть конечное взаимодействие систем. Если периоды пульсаций энергии, соответствующих явлению резонанса, будут больше времени жизни, то проведенные выше рассуждения потеряют смысл.

Выше мы подчеркнули, что исключение всех систем термов, кроме одной определенной, возможно без нарушения законов квантовой механики. Однако при этом необходимо отметить, что такое исключение все же влечет за собой некоторые весьма характерные ограничения. Именно, оно означает, что для атомной системы не имеет смысла говорить о движении или об изображающей это движение матрице одного отдельного электрона, или о матрице какой-нибудь несимметричной функции электронов. Ведь такая матрица в общем случае содержала бы члены, отвечающие переходам из одной системы термов в другую, т. е. несуществующую, систему термов. Поэтому, например, перестановочным соотношениям в их обычной форме в общем случае также нельзя придавать физический смысл; это относится, вероятно, и ко всем симметризованным формам перестановочных соотношений. Однако при этом речь идет только о формальном ограничении, ибо все принципиально наблюдаемые величины по своему существу даются симметричными функциями электронов.

До математического изучения систем, состоящих из n одинаковых подсистем, изложенные выше соображения следовало бы рассматривать только в качестве программы исследований. Поэтому я хочу в дополнение кратко указать, каким образом можно однозначно построить в общем случае систему термов, которая не приведет к эквивалентным состояниям подсистем и останется единственным решением.

Пусть n совершенно одинаковых подсистем находятся в стационарных состояниях, характеризуемых «квантовыми числами» $m_1, m_2, \ldots, m_n$. Тогда все состояния системы, получаемые из только что указанных состояний какой-нибудь перестановкой чисел $m_1 \ldots m_n$, будут иметь одинаковую энергию. Энергия взаимодействия H^1 в первом приближении будет содержать только те члены, которые соответствуют переходам не более чем двух подсистем, если H^1 складывается аддитивно из парных взаимодействий между подсистемами. Для того, чтобы матрицу средней по времени энергии возмущения W^1 привести к диагональному виду, необходимо, как и в § 2, совершить каноническое преобразование. Для нахождения его, как известно, следует решить систему $n!$ уравнений с $n!$ неизвестными S_k. Обозначим через H^1_α тот член в H^1, которому не отвечает ни один переход одной из подсистем; через $H^1_\beta, H^1_\gamma, \ldots H^1_\nu$ те члены, которые соответствуют попарным перестановкам чисел $m_1, \ldots, m_n$ (всего этих членов имеется $\frac{n(n-1)}{2}$); затем расположим $n!$ состояний с одинаковой энергией так, что на первом месте будет состояние $m_1 \ldots m_n$, потом все состояния, которые получаются из него при одной «транспозиции»; потом все состояния, для получения которых из первого состояния требуются *две* транспозиции и т. д. Характеристический определитель системы $n!$ линейных уравнений тогда примет вид

$$\begin{vmatrix} W - H^1_\alpha & -H^1_\beta & -H^1_\gamma & \ldots & -H^1_\nu & 0 & \ldots & 0 \\ -H^1_\delta & W - H^1_\alpha & 0 & \ldots & 0 & -H^1_\varepsilon & & \ldots \\ -H^1_\eta & 0 & W - H^1_\alpha & 0\ldots & 0 & -H^1_\zeta & & \ldots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{vmatrix} = 0. \qquad (18)$$

Решение этой системы уравнений гласит:

$$W^1 = H_\alpha^1 - H_\beta^1 - H_\gamma^1 - \ldots - H_\nu^1; \quad S_k = \frac{1}{\sqrt{n}}(-1)^{\delta_k}, \tag{19}$$

где числа δ_k означают такое количество транспозиций, какое необходимо для того, чтобы перевести состояние $m_1 \ldots m_n$ в состояние с номером k. Принадлежащая этому решению шредингеровская собственная функция имеет тогда вид

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum (-1)^{\delta_k} \varphi_1(m_\alpha^k) \varphi_2(m_\beta^k) \ldots \varphi_n(m_\nu^k), \tag{20}$$

причем δ_k снова обозначает количество транспозиций, необходимое для преобразования последовательности $m_1 m_2 \ldots m_n$ в последовательность $m_\alpha^k m_\beta^k \ldots m_\nu^k$. Эта функция φ обладает тем особым свойством, что она изменяет знак при перестановке квантовых чисел двух подсистем. Отсюда немедленно следует, что система термов, характеризуемая функцией (20), не может комбинировать с состояниями, в которых не менее двух подсистем находятся в эквивалентных состояниях. Ведь собственная функция ψ *такого* состояния должна быть обязательно инвариантной относительно перестановки эквивалентных подсистем. Если f означает функцию координат подсистемы, изображающую излучение и потому необходимо симметричную (или симметричный оператор), то для интеграла имеем

$$\int f \psi \varphi \, d\Omega = 0, \tag{21}$$

так как при перестановке двух эквивалентных подсистем знак его изменяется, а величина сохраняется.

По индукции (заключение от n к $n+1$) можно показать, что термы типа (20) действительно образуют замкнутую систему, т. е. не комбинируют ни с какими другими термами, и что данная функция (20) система термов является единственной системой, не содержащей эквивалентных состояний. Правда, мне еще не удалось получить строгое доказательство этого утверждения. Несмотря на эту нестрогость, можно считать, что уравнением (20) определяется построение системы термов, соответствующей решению.

После этого скорее математического дополнения я возвращаюсь к физическому содержанию исследования. Связь между статистикой Бозе—Эйнштейна для тождественных частиц и квантовой механикой заключается, следовательно, в выборе одного определенного квантовомеханического решения из многих возможных решений. Такой выбор для достаточно слабого взаимодействия сводится в основном к фазовому соотношению между подсистемами или частицами. Быть может при более глубоком исследовании этого фазового соотношения получились бы результаты, которые можно было бы считать совершенно аналогичными интерференции волн де Бройля. Возможно также, что более глубокое изучение причин, по которым выбирается одно решение, приведет уже к большим физическим трудностям, которые появляются в задачах о связи. Однако на мой взгляд, из проведенного исследования можно прийти к выводу, что для расчета спектров атомов с многими электронами нам, вероятно, не требуется разрешать эти трудности. Напротив, для определения этих спектров достаточно одной квантовой механики.

ЗАДАЧИ МНОГИХ ТЕЛ И РЕЗОНАНС В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ. II*

Законы квантовой механики применяются к атомам с многими электронами. В частности, исследуется вопрос о том, каким образом взаимосвязаны квантовомеханическое явление резонанса и мультиплетная структура систем термов сложных атомов. Исследование аналогичного явления резонанса в теории молекул и их полосатых спектров приводит к объяснению известных аномалий в интенсивностях некоторых вращательных полос.

Спектры атомных систем с двумя электронами могут быть количественно описаны квантовой механикой с достоверностью хотя бы приближенно[1]. Существенно новое, что появляется в задаче многих тел по сравнению с атомными системами с одним электроном — это явление резонанса, которое приводит к разбиению полной системы термов на некомбинирующие подсистемы, каждая из которых образует «замкнутое» квантовомеханическое решение. Одна из этих систем отвечает принципу Паули[2], согласно которому в атоме не могут существовать эквивалентные орбиты электронов. Эта подсистема была произвольно выбрана в качестве физического решения. Такой выбор отдельного решения позволяет изменить статистику так, как было предложено Бозе и Эйнштейном[3]. К подобным же результатам независимо пришел Дирак[4]. Дирак особенно подчеркнул, что в совершенно общем случае следует выбирать решение, отвечающее принципу Паули, и благодаря этому он пришел к статистике идеального газа, которая в основных чертах согласуется с теорией вырождения газа Ферми[5]. Эти результаты в принципе дают квантовомеханическое решение для атомных систем с многими электронами. Но для того, чтобы показать, что получаемые таким образом решения в самом деле качественно соответствуют наблюдаемым на опыте спектрам этих атомов, необходимо дальнейшее общее рассмотрение.

---

* Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik. II. — Zs. Phys., 1927, **41**, 239–267. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1926, **38**, 411 (в дальнейшем цитируется как часть I); **39**, 499. — Русский перевод: с. 176–186.

[2] *Pauli W.* Zs. Phys., 1925, **31**, 765. — Русский перевод: *Паули В.* Труды по квантовой теории. Общие принципы волновой механики. Статьи 1920–1928. М.: Наука, 1975. С. 645.

[3] *Bose S. N.* Zs. Phys., 1924, **26**, 178; *Einstein A.* Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., 1924, 261; 1925, 3. — Русский перевод: *Эйнштейн А.* Собрание научн. трудов. Т. 3. М.: Наука, 1966. С. 481, 489.

[4] *Dirac P.* Proc. Roy. Soc. London, 1926, **A 112**, 661.

[5] *Fermi E.* Lincei Rend., 1926, **3**, 145.

I

ОБЩИЕ ОСНОВЫ

Следующие вычисления можно проделать на основе обычных до сих пор формальных схем квантовой механики, т. е., с одной стороны, с помощью матриц, соответствующих классическим рядам Фурье и, с другой стороны, с помощью шредингеровских волн в фазовом пространстве. Но формальные соотношения — также для задач многих тел — приобретают более общий и симметричный вид с помощью более общего математического аппарата квантовой механики, недавно развитого Дираком и Иорданом[6]. Я повторю здесь важнейшие основные понятия.

Решение квантовомеханической задачи дается решением задачи на собственные значения (см. Квантовая механика II, глава 3, уравнение (13)):

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{S} = \mathbf{W} \quad \text{или} \quad \mathbf{H}\mathbf{S} - \mathbf{S}\mathbf{W} = 0; \quad \mathbf{S}\widetilde{\mathbf{S}}^* = 1. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{H}$ — гамильтонова функция системы, зависящая от $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$, $\mathbf{W}$ — диагональная матрица энергии, диагональные элементы которой представляют собственные значения задачи, $\mathbf{S}$ — искомая матрица преобразования. В первоначальной формулировке уравнения (1) под $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ в $\mathbf{H}$ следовало подразумевать снова матрицы, которые соответствуют рядам Фурье, полученным при решении какой-нибудь выбранной подходящим образом исходной задачи. Тогда уравнение (1) в общем случае было бы сложным линейным дифференциальным уравнением бесконечно высокого порядка относительно матрицы S_{nl}, собственные значения которых W_n давали энергию стационарных состояний. По Дираку можно ввести более общие матрицы. Эти матрицы можно выбрать, например, так, что координаты системы $\mathbf{q}$ $(\mathbf{q}_1, \ldots, \mathbf{q}_f)$ станут диагональными матрицами; разумеется вследствие соотношений $\mathbf{p}_k\mathbf{q}_k - \mathbf{q}_k\mathbf{p}_k = \frac{h}{2\pi i}$ импульсы $\mathbf{p}$ $(\mathbf{p}_1, \ldots, \mathbf{p}_f)$ тогда уже не будут диагональными матрицами. Тогда также можно ввести любую другую систему канонических переменных $\boldsymbol{\xi}, \eta$ $(\boldsymbol{\xi}_1, \ldots, \boldsymbol{\xi}_f, \eta_1, \ldots, \eta_f)$, удовлетворяющих перестановочным соотношениям, и можно, например, выбрать все матрицы $\boldsymbol{\xi}$ в диагональном виде. В качестве индексов в матрице $\mathbf{S}$ тогда будут присутствовать номера состояния с энергией W_n и числа $\boldsymbol{\xi}$:

$$\mathbf{S}\colon\ (S(n, \xi)) \quad \text{или} \quad (S_n(\xi)). \tag{2}$$

Тогда уравнение (1) будет эквивалентно[7] следующему уравнению:

$$\left[H\left(\xi, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial \xi}\right) - W_n\right] S_n(\xi) = 0, \tag{3}$$

откуда можно определить $S_n(\xi)$. Уравнение (3) должно быть дополнено условиями ортогональности и нормировки:

$$\mathbf{S}\widetilde{\mathbf{S}}^* = 1 \quad \text{или} \quad \sum_{\xi} S_n(\xi) S_m^*(\xi) = \delta_{nm} \tag{4}$$

---

[6] *Dirac P. A. M.* Proc. Roy. Soc. London, 1926, **A112**, 661. Выражаю благодарность Дираку П. за возможность ознакомления с его работой до публикации. Между тем я узнал из дружеского письма, что П. Иордан (*Jordan P.* Zs. Phys., 1927, **45**, 751) также получил независимо результаты, эквивалентные результатам работы Дирака и предшествующей ей заметки автора (*Heisenberg W.* Zs. Phys., 1926, **40**, 501). Некоторые из этих результатов были уже сообщены автору ранее и независимо В. Паули. См. также важные исследования *Lanczos K.* Zs. Phys., 1926, **35**, 812.

Примечание при корректуре. См. также работу *London F.* Zs. Phys., 1926, **40**, 193.

[7] Эквивалентность матриц и операторов была открыта еще М. Борном и Н. Винером (*Born M., Wiener N.* Zs. Phys., 1926, **36**, 174). Эта эквивалентность играет существенную роль также в исследовании Э. Шредингера (*Schrödinger E.* Ann. Phys., 1926, **79**, 734) и в полной общности осознана и применена П. Дираком (*Dirac P. A. M.* Proc. Roy. Soc. London, 1926, **A112**, 661).

или, если ξ принимает не дискретные, а непрерывные значения

$$\int S_n(\xi)S_m^*(\xi)\,d\xi = \delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{при } n = m, \\ 0 & \text{при } n \neq m. \end{cases} \tag{4'}$$

В подробной записи эти уравнения гласят

$$\sum_{\xi_1,\xi_2,\ldots,\xi_f} S_n(\xi_1\ldots\xi_f)S_m^*(\xi_1\ldots\xi_f) = \delta_{nm}$$

или

$$\int S_n(\xi)S_m^*(\xi)\,d\xi_1\ldots d\xi_f = \delta_{nm}.$$

В частном случае, когда величина ξ означает координаты q, а η — импульсы p, уравнение (3) переходит в дифференциальное уравнение Шредингера. В частном случае $\xi = J$, $\eta = w$, где J — переменная действия и w — угловая переменная какой-нибудь соответственно выбранной системы, уравнение (3) переходит в первоначально сформулированное уравнение (1). В общем случае $\mathbf{S}$ — матрица, в которой индекс n — принимает дискретные, а второй индекс ξ — непрерывные значения. В частном случае $\xi = q$, $\eta = p$ эта матрица содержит единственный столбец $S_n(q)$ — шредингеровскую собственную функцию. Величины $S_n(\xi)$ и $S_n^*(\xi)$ содержат все утверждения, относительно одного стационарного состояния атома с номером n. Обычные матричные элементы функции $f(\xi,\eta)$ по отношению к диагональной матрице энергии определяются как $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{f}\mathbf{S}$ или

$$f_{nm} = \sum_{\xi} S_n^*(\xi) f\left(\xi, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial\xi}\right) S_m(\xi), \tag{5}$$

или

$$f_{nm} = \int S_n^*(\xi) f\left(\xi, \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial\xi}\right) S_m(\xi)\,d\xi. \tag{5'}$$

Физически произведение

$$S_n^*(\xi^0)S_n(\xi^0)$$

или, в случае непрерывной переменной ξ,

$$S_n^*(\xi^0)S_n(\xi^0)\,d\xi$$

означает вероятность того, что в стационарном состоянии n переменные ξ принимают значения ξ^0 или, для случая непрерывных переменных, что ξ лежат между ξ^0 и $\xi^0 + d\xi^0$ [8]. Величины $S_n(\xi)$ в общем случае называются «собственными функциями» квантовотеоретической задачи. Они зависят от стольких независимых переменных, сколько степеней свободы имеет задача: $S_n(\xi_1\ldots\xi_f)$. Если в уравнениях (1) или (3) переменные для различающихся степеней свободы могут быть разделены, то $\mathbf{S}$ можно представить в виде произведения функций, соответствующих отдельным степеням свободы

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_n^1(\xi_1)\mathbf{S}_n^2(\xi_2)\ldots\mathbf{S}^f(\xi_f). \tag{6}$$

Для следующих вычислений особенно важное значение имеет случай одного электрона, у которого, однако, учитывается магнитный момент, создаваемый,

[8] *Heisenberg W.* Schwankungserscheinungen und Quantenmechanik; см. также *Jordan P.* Zs. Phys., 1927, **45**, 751.

по гипотезе Уленбека и Гоудсмита[9], собственным вращением электрона. Такой электрон имеет четыре степени свободы (полный момент «спина», поскольку он имеет заданное постоянное значение $s = 1/2$, здесь не учитывается[10], например, три пространственных координаты центра тяжести и положение «линии узлов» собственного вращения, с которым сопрягается проекция m_s спина s на заданную ось. Если сначала пренебрегать взаимодействием магнитного момента электрона и движением его центра тяжести, то S можно записать в виде

$$S(\xi_1\xi_2\xi_3)S^4(\xi_4).$$

Если в качестве ξ_4 взять только что упомянутое положение линии узлов, то для определения S^4 потребуется рассмотрение вращающегося электрона по теории Шредингера. Однако эта задача сопряжена с известными формальными трудностями. Но поскольку выбор ξ_4 остается совершенно произвольным и поскольку, с другой стороны, квантовомеханическое описание вращающегося электрона на языке матриц известно, то такое определение $S^4(\xi_4)$ оказывается излишним; можно, например, выбрать в качестве ξ_4 проекцию m_s момента s на фиксированную внешнюю ось, и тогда S^4 становится единичной матрицей; m_s принимает только два значения $\pm 1/2$.

II

АТОМНЫЕ СИСТЕМЫ С МНОГИМИ ЭЛЕКТРОНАМИ

§1

Исследования последних лет позволили выполнить систематическое упорядочение спектров сложных атомов в том смысле, что каждому «терму» стало возможным сопоставлять определенное движение электронов в атоме, основываясь на принципе соответствия в духе теории Бора применительно к спектрам и к периодической системе. Важнейшими шагами на пути к этой систематике могут быть названы: предложенная Зоммерфельдом классификация термов по числам n, k, j; теория Ланде для эффекта Зеемана; открытие мультиплетов Каталаном; открытие принципа Паули, исключающего эквивалентные орбиты; модель Рассела—Саундерса; систематика Хунда для спектров высших периодов периодической системы; гипотеза Уленбека—Гоудсмита о вращательном моменте электрона. Обзор результатов в этой области квантовой теории, полученных благодаря указанным достижениям, недавно был сделан в книге Хунда; поэтому я отсылаю за всеми подробностями к этой книге[11].

В модельных представлениях, лежащих в основе такой классификации термов, всегда присутствовала вполне определенная аналогия между квантовотеоретическими законами и классической механикой, которую можно называть «адиабатическим» соответствием. Движение одного электрона определялось силами, действующими на него со стороны ядра и других электронов, причем движение других электронов учитывались в среднем; более тонкие детали взаимодействия электронов в атоме не рассматривалось. Поскольку непрерывный обмен энергией между электронами в атоме, который всегда происходил бы в случае классических моделей, запрещается[12] основными постулатами квантовой теории (см. опыты

---

[9] *Uhlenbeck G. E., Goudsmit S.* Naturwiss., 1925, **13**, 47.

[10] Величины импульсов для простоты далее будут всегда приводиться в форме их квантовых чисел.

[11] *Hund F.* Linienspektra und periodisches System der Elemente. Berlin, Springer, 1927.

[12] *Bohr N.* Nature, 1924, **113**, 223.

Франка—Герца по столкновениям), то можно надеяться, что указанное выше грубое «адиабатическое» соответствие будет отражать существенные черты истинных закономерностей; такие надежды подтверждаются и классификацией спектров. Однако количественное описание этих закономерностей возможно, конечно, только в квантовой теории.

Но, с другой стороны, это грубое соответствие и не могло бы полностью объяснить действительные квантовомеханические явления, ибо в квантовой механике должна была бы существовать также аналогия этому более тонкому механическому взаимодействию электронов. Однако эта сторона квантовой механики уже совсем не поддается объяснению на основании механических модельных представлений. Ведь в более тонких взаимодействиях электрона в атоме, как и при взаимодействии электрона с внешним излучением, непосредственно проявляются черты дискретного характера, присущие квантовой теории [13]. Само возникновение квантовой механики прямо связано со стремлением найти общие закономерности, одинаковые для взаимодействия данного электрона с внешним излучением, с одной стороны, и с остальными электронами, с другой. Итак, квантовая механика дает нам возможность простого рассмотрения указанного более тонкого взаимодействия, а следовательно, и явления резонанса, речь о котором пойдет ниже.

То обстоятельство, что в упомянутой выше грубой картине, основанной на принципе соответствия, более тонкое взаимодействие электронов не имеет аналога, должно было бы приводить к противоречию между моделью и опытом. Такое противоречие и было обнаружено, когда были открыты мультиплеты. Как известно, мультиплеты возникают потому, что магнитные моменты электронов, существующие по гипотезе Уленбека—Гоудсмита, выстраиваются параллельно или антипараллельно и только потом уже складываются с орбитальным моментом электронов l, образуя в сумме полный момент j. В механической модели магнитные моменты электронов не выстраивались бы параллельно, так как они взаимодействуют между собой с чрезвычайно слабыми силами. Но даже если бы это взаимодействие было очень сильным, то оно зависело бы не только от относительного направления магнитных моментов, но и от относительного взаимного положения центров тяжести электронов и особенно от направлений, выделяемых этими центрами тяжести; и тогда магнитные моменты не могли бы выстраиваться параллельно. Поэтому мы должны ожидать, что для объяснения мультиплетной структуры и связанных с нею закономерностей решающее значение имеет квантовомеханический резонанс.

§ 2

Поскольку силы, связывающие магнитные моменты электронов с движением центров тяжести электронов, в общем случае малы, то в первом приближении эти силы можно было бы не учитывать. Из эмпирических результатов для этого предельного случая (т. е. когда мультиплетное расщепление очень мало по сравнению с расстоянием между разными мультиплетами) следовало, что полная система термов атома может быть подразделена на подсистемы, не вступающие в перекрестные комбинации (см. орто- и парасистему в спектре гелия).

Произведем сначала такое разбиение на некомбинирующие системы термов для n точечносимметричных электронов. При этом будем исходить из «невозмущенной» системы, в которой взаимодействие между электронами отсутствует, и будем рассчитывать взаимодействие как возмущение. В невозмущенной системе электроны могут находиться в различных стационарных состояниях, которым принадлежат собственные функции $l, m, \ldots, p$. Припишем каждой собственной

[13] См. *Heisenberg W.* Schwankungserscheinungen und Quantenmechanik.

функции индекс, равный номеру электрона, от координат которого она зависит (например, $l_1, m_2, \ldots, p_n$). Собственная функция всей системы для невозмущенной задачи может быть написана в виде произведения всех собственных функций отдельных электронов, например, $l_1 m_2 \ldots p_n$. Невозмущенная функция оказывается $n!$-кратко вырожденной, так как при перестановке электронов значения энергии всей системы остаются неизменными. Поэтому в качестве собственных функций могут выступать и некоторые линейные комбинации таких произведений. После того, как система термов невозмущенной задачи будет подразделена на некомбинирующие подсистемы, никакое взаимодействие электронов не сможет нарушить это подразделение — в предположении, что все электроны одинаковы и поэтому действуют друг на друга с одинаковыми силами. Таким образом, разбиение на некомбинирующие подсистемы термов совершенно не зависит от рода взаимодействия; в то же время оно служит решающим звеном на пути к решению задачи с взаимодействием. Математически подразделение на некомбинирующие системы термов можно сформулировать двумя способами:

1. Последовательность некомбинирующих систем термов определяется тем, что собственная функция какой-нибудь из этих систем, умноженная на симметричную функцию электронов, может быть разложена в ряд по собственным функциям только тождественной с ней системы. Или:

2. Если u и v — собственные функции двух *различных* систем, то интеграл $\int u^* v f \, d\xi$ (см. уравнение (5)) должен обращаться в нуль, если f — какая-либо симметричная функция электронов.

Попытаемся теперь построить такие системы, начиная с собственной функции

$$u = l_1 m_2 \ldots p_n. \tag{7}$$

Пусть все собственные функции $l, m, \ldots, p$ будут различны. В невозмущенной системе имеется $n!$ термов с одинаковой энергией; соответствующие собственные функции получаются из (7), если индексы, обозначающие номер электрона, будут каким-либо образом переставляться. Введем для номеров электронов подстановку S и, как обычно в теории групп, положим:

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & n \\ a_1 & a_2 & \ldots & a_n \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Для собственных функций введем обозначение

$$Su = l_{a_1} m_{a_2} \ldots p_{a_n}. \tag{9}$$

Под степенью подстановки подразумевается многократное применение той же подстановки; под $S^0 = 1$ — «тождественная» подстановка. Всегда существует наименьшая степень S^ν подстановки S, для которой (при $\nu > 0$)

$$S^\nu = 1. \tag{10}$$

Тогда ν называется степенью подстановки S. Поставленная здесь задача о некомбинирующих системах термов самым тесным образом связана с теорией групп перестановок[14]. Пусть ω будет простым корнем уравнения

$$\omega^\nu = 1. \tag{11}$$

[14] См., например, *Serret J.* Handbuch der höheren Algebra. Leipzig, 1879. Bd. 2, S. 260.

Образуем суммы собственных функций

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{1}{\sqrt{\nu}}\left(u + Su + S^2u + \ldots + S^{\nu-1}u\right),\\ U_\omega &= \frac{1}{\sqrt{\nu}}\left(u + \omega Su + \omega^2 S^2 u + \ldots + \omega^{\nu-1}S^{\nu-1}u\right),\\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\ U_{\omega^{\nu-1}} &= \frac{1}{\sqrt{\nu}}\left(u + \omega^{\nu-1}Su + \omega^{2(\nu-1)}S^2u + \ldots + \omega^{(\nu-1)^2}S^{\nu-1}u\right) \end{aligned} \tag{12}$$

(множитель $1/\sqrt{\nu}$ введен здесь для того, чтобы собственные функции U оставались нормированными, если таковыми были собственные функции u).

В общем случае эти ν собственных функций U включают в себя лишь часть линейно независимых собственных функций. По известным теоремам ν всегда является делителем $n!$. Выберем теперь какую-нибудь собственную функцию w, которая получается из (7) при перестановке, но не содержится среди функций $u, Su, \ldots, S^{\nu-1}u$, и применим к ней такую же процедуру с той же подстановкой S, какую прежде мы применяли к u. Тогда мы получим новые собственные функции $W_1, W_\omega, \ldots, W_{\omega^{\nu-1}}$. Этот процесс мы будем продолжать до тех пор, пока в функции (7) не будут исчерпаны все $n!$ перестановок. Если мы объединим *все* термы, принадлежащие к некоторой определенной степени ω, ω^λ, в единую систему термов $\Gamma_{\omega^\lambda}/$ — причем Γ_{ω^λ} может содержать и термы для *каких-нибудь других* функций, отличающихся от $l, m, \ldots, p$ — то для полученных систем будет справедлива следующая теорема.

Системы $\Gamma_1, \Gamma_\omega, \ldots, \Gamma_{\omega^\lambda}$ не комбинируют друг с другом.

Чтобы убедиться в этом, образуем интеграл (или соответствующую сумму, см. (5)).

$$\int \gamma^*_{\omega^\lambda}\gamma'_{\omega^\mu} f\, d\xi, \tag{13}$$

где $\gamma^*_{\omega^\lambda}, \gamma'_{\omega^\mu}$ — означают какие-нибудь собственные функции систем Γ_{ω^λ} или Γ_{ω^μ}, f — симметричная функция электронов. Если под интегралом (13) произвести любую перестановку номеров электронов, то значение интеграла не может измениться. Применим к подынтегральному выражению, в частности, перестановку S. Из уравнений (12) вообще следует, что выполняется равенство $S\gamma_{\omega^\lambda} = \omega^{-\lambda}\gamma_{\omega^\lambda}$. Таким образом, при применении подстановки S, интеграл (13) переходит в

$$\omega^{+\lambda-\mu}\int \gamma^*_{\omega^\lambda}\gamma'_{\omega^\mu} f\, d\xi,$$

и отсюда следует,

$$\left(1 - \omega^{+\lambda-\mu}\right)\int \gamma^*_{\omega^\lambda}\gamma'_{\omega^\mu} f\, d\xi = 0. \tag{14}$$

Следовательно, интеграл в левой части, определяющий комбинации, равен нулю для $\lambda \neq \mu$, т.е. системы $\Gamma_{\omega^\lambda}, \Gamma_{\omega^\mu}$ не комбинируют друг с другом, и комбинации возможны *только* внутри одной системы Γ.

Подразделение на некомбинирующие системы термов иногда можно продолжить дальше таким образом, что некоторые или все системы Γ снова распадаются на различные подсистемы. Возьмем некоторую определенную собственную функцию системы Γ_{ω^λ}:

$$U_{\omega^\lambda} = \frac{1}{\sqrt{\nu}}\left(u + \omega^\lambda Su + \omega^{2\lambda}S^2u + \ldots + \omega^{(\nu-1)\lambda}S^{\nu-1}u\right). \tag{15}$$

Если существует новая подстановка T степени μ такая, что

$$T\left(1+\omega^{\lambda}S+\omega^{2\lambda}S^{2}+\ldots+\omega^{(\nu-1)\lambda}S^{\nu-1}\right)=\left(1+\omega^{\lambda}S+\omega^{2\lambda}S^{2}+\ldots+\omega^{(\nu-1)\lambda}S^{\nu-1}\right)T, \quad (16)$$

то мы образуем функции ($\varepsilon^{\mu}=1$)

$$Z_{\omega^{\lambda},\varepsilon^{k}}=\frac{1}{\sqrt{\nu}}\left(U_{\omega^{\lambda}}+\varepsilon^{k}TU_{\omega^{\lambda}}+\varepsilon^{2k}T^{2}U_{\omega^{\lambda}}+\ldots+\varepsilon^{(\mu-1)k}T^{\mu-1}U_{\omega^{\lambda}}\right) \quad (17)$$

и разобьем таким образом систему термов $\Gamma_{\omega^{\lambda}}$ на μ новых систем, которые не комбинируют между собой, ибо тогда в соответствии с уравнением (13) комбинировать могут только термы с одинаковыми степенями ε. Однако для подстановки T должно выполняться условие (16), чтобы собственная функция $TU_{\omega^{\lambda}}$ снова принадлежала системе $\Gamma_{\omega^{\lambda}}$.

Условие (16) выполняется для всех систем $\Gamma_{\omega^{\lambda}}$, если T и S коммутируют, т. е. если

$$ST=TS. \quad (18)$$

Элементарная теория групп дает общие методы нахождения по заданной S подстановок T, удовлетворяющим этому условию. Если ω^{λ} является простым ν-м корнем из единицы, то подстановка T даже *должна* удовлетворять условию (18), для того чтобы было выполнено условие (16).

Если ω^{λ} не является простым ν-м корнем I, то в общем случае все же существуют подстановки T, которые не коммутируют с S, но, тем не менее, удовлетворяют уравнению (16). Следовательно, в общем случае системы термов $\Gamma_{\omega^{\lambda}}$, не принадлежащие простым корням ω^{λ}, могут быть подвергнуты более глубокому разбиению, чем системы, принадлежащие простым корням единицы.

Следует еще указать на то, что тождественная подстановка I и какая-нибудь степень S: S^{r}, взятые в качестве T, безусловно удовлетворяют уравнению (18), но не приводят к новому разбиению систем $\Gamma_{\omega^{\lambda}}$.

Вопрос о том, на сколько некомбинирующих систем термов распадается схема термов атома с n электронами, не может быть здесь решен в самом общем случае. Однако мы все же можем находить разбиение в каждом частном случае, применяя указанный выше прием. Поскольку существенное значение для практики имеет возможность производить такое разбиение за наименьшее число шагов, мы будем интересоваться большей частью перестановками высокой степени, так как они приводят к разбиению на, соответственно, большее число систем термов. Степень подстановки проще всего можно определить, рассматривая циклические перестановки. Циклическую перестановку системы $(a_1a_2\ldots a_z)$ в общепринятом обозначении (8) можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_z \\ a_2 & a_3 & \ldots & a_1 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Степень этой подстановки равна числу ее элементов z. Каждую подстановку можно представить в виде произведения многих циклических перестановок из различных элементов. Таким образом, если $z_1, z_2, \ldots$ означают степени различных циклов, на которые можно разложить S, то мы имеем

$$z_1+z_2+\ldots=n$$

и наименьшее общее кратное значений $z_1, z_2, \ldots$ указывает степень S. Например, в случае 12 электронов на различных квантовых орбитах в качестве S были бы возможны подстановки высокой степени следующего типа

$$S=(1\ 2\ 3\ 4\ 5)\ (6\ 7\ 8\ 9\ 10\ 11\ 12).$$

Степень S здесь равна $5 \cdot 7 = 35$, и описанный выше процесс разбиения дает 35 некомбинируемых систем термов. Далее

$$S = (1\ 2\ 3)\ (4\ 5\ 6\ 7)\ (8\ 9\ 10\ 11\ 12).$$

Степень в этом случае равна $3 \cdot 4 \cdot 5$ и, соответственно, получается разбиение на 60 некомбинирующих систем. Это, очевидно, и есть самое большое число некомбинирующих систем, которое может получиться за один шаг для $n = 12$ при разбиении по описанному выше методу.

В случае, когда некоторые из собственных функций $l, m, \ldots, p$ будут одинаковыми, т. е. в случае эквивалентных электронов, число различных термов с одинаковой энергией будет равно уже не $n!$, а $\frac{n!}{n_\alpha! n_\beta! \ldots}$, где $n_\alpha, n_\beta, \ldots$ обозначают числа электронов в состояниях $\alpha, \beta, \ldots$ и т. д. В этом случае при применении описанного выше метода следует выбирать такие подстановки S, для которых степень равна делителю выражения $\frac{n!}{n_\alpha! n_\beta! \ldots}$, и с ними потом производить разбиение на некомбинирующие термы.

В качестве примера применения этих методов мы разберем вычисления для атома лития, $n = 3$[15].

Пусть собственная функция исходной системы будет

$$u = l_1 m_2 p_3.$$

Предположим сначала, что числа l, m и p различны. Постановка наивысшей степени здесь циклическая, например, (1 2 3). Если ε означает простой третий корень I, то в соответствии с (12) сначала получаем

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(l_1 m_2 p_3 + l_2 m_3 p_1 + l_3 m_1 p_2\right), \\ U_\varepsilon &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(l_1 m_2 p_3 + \varepsilon l_2 m_3 p_1 + \varepsilon^2 l_3 m_1 p_2\right), \\ U_{\varepsilon^2} &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(l_1 m_2 p_3 + \varepsilon^2 l_2 m_3 p_1 + \varepsilon l_3 m_1 p_2\right). \end{aligned} \tag{20}$$

Среди собственных функций (20) функция $m_1 l_2 p_3$ еще не встречается. Таким образом, возникает еще одна последовательность $W_1, W_\varepsilon, W_{\varepsilon^2}$. Три некомбинирующие системы термов проще всего можно представить в виде

$$\Gamma_\eta = \begin{cases} \gamma_\eta^{\rm I} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\left(l_1 m_2 p_3 + \eta l_2 m_3 p_1 + \eta^2 l_3 m_1 p_2\right), \\ \gamma_\eta^{\rm II} = \dfrac{1}{\sqrt{3}}\left(m_1 l_2 p_3 + \eta m_2 l_3 p_1 + \eta^2 m_3 l_1 p_2\right), \end{cases} \tag{21}$$

где η принимает для трех систем значения 1, ε, ε^2, соответственно. Системы термов Γ_ε и Γ_{ε^2} уже не поддаются дальнейшему разбиению, так как с подстановкой (1 2 3) коммутируют только ее степени. Напротив, Γ_1 не принадлежит простому корню из единицы. Если мы возьмем в качестве T произвольную транспозицию, то

[15] *Примечание при корректуре.* В работе, появившейся во время печатания статьи, Вигнер (*Wigner E.* Zs. Phys., 1926, **40**, 492) независимо получил для задачи трех электронов результаты, эквивалентные приведенным ниже.

для T будет выполнено уравнение (16). Степень подстановки T равна 2, две некомбинирующие системы термов, на которые разбивается Γ_1, принадлежат квадратным корням из 1: $+1$ и -1. Собственные функции имеют вид

$$\Gamma_{1,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_1^{\mathrm{I}} + \gamma_1^{\mathrm{II}}), \quad \Gamma_{1,-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_1^{\mathrm{I}} - \gamma_1^{\mathrm{II}}). \tag{21a}$$

Эти функции $\Gamma_{1,1}$ и $\Gamma_{1,-1}$ хорошо известны — им соответствуют симметричная и антисимметричная системы термов.

В системах $\Gamma_{1,1}$ и $\Gamma_{1,-1}$ задача о невозмущенном атоме уже не является вырожденной, так как $\Gamma_{1,1}$ и $\Gamma_{1,---1}$ содержат только по одному терму с определенной энергией в невозмущенном состоянии. Внутри же систем Γ_ε и Γ_{ε^2} существует вырождение в том смысле, что для невозмущенного состояния в них имеется по два терма с одинаковой энергией. Это вырождение снимается при взаимодействии так, как это определяется видом взаимодействия.

Матрица энергии взаимодействия, усредненной по невозмущенному движению, содержит четыре существенно различных члена, один член «среднего значения» $W_{l,m,p;l,m,p} = A$ и три «резонансных» члена, которые соответствуют перестановкам двух электронов:

$$W_{l,m,p;m,l,p} = B, \quad W_{l,m,p;p,m,l} = C, \quad W_{l,m,p;l,p,m} = D.$$

Взаимодействие учитывается в задаче о возмущении, решение которой по известным причинам дается следующим определителем

$$\begin{vmatrix} W - A & -(B + \eta C + \eta^2 D) \\ -(B + \eta^2 C + \eta^2 D) & W - A \end{vmatrix} = 0.$$

Отсюда получаются шесть решений (22):

$\Gamma_{1,1}$	Γ_ε	Γ_{ε^2}
$W = A + B + D + C$ С.ф. $\frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_1^{\mathrm{I}} + \gamma_1^{\mathrm{II}})$ $\Big\}\ \Gamma_{1,1}$	$W = A + R$ С.ф. $\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{I}} + e^{-i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{II}})$	$W = A + R$ С.ф. $\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{I}} + e^{i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{II}})$
$W = A - B - D - C$ С.ф. $\frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma_1^{\mathrm{I}} - \gamma_1^{\mathrm{II}})$ $\Big\}\ \Gamma_{1,-1}$	$W = A - R$ С.ф. $\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{I}} - e^{-i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{II}})$	$W = A - R$ С.ф. $\frac{1}{\sqrt{2}}(e^{-i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{I}} - e^{i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{II}})$

(22)

Здесь сделана подстановка $B + \eta C + \eta^2 D = Re^{2i\varphi}$.

В системе термов (22) существует характеристическое вырождение в том смысле, что для каждого терма в системе Γ_ε имеется терм с такой же энергией в системе Γ_{ε^2}. Формально это вырождение связано с тем, что матричные элементы энергии взаимодействия B, C, D вещественны. Они остаются вещественными для взаимодействия любого вида, и это вырождение является существенной особенностью резонанса. Далее мы еще вернемся к обсуждению мультиплетной структуры систем термов. Пока же заметим, что вследствие указанного вырождения разбиение на некомбинирующие системы термов может быть до известной степени неопределенным.

Если два электрона эквивалентны, например $l = m$, то Γ-разбиение дает уже полную схему термов с одной собственной функцией $\gamma_\eta^{\mathrm{I}} = \gamma_\eta^{\mathrm{II}}$. Тогда внутри одной

системы Γ_η вырождения уже не бывает, далее имеем $A = D$, $B = C$; мы получаем решения

$\Gamma_{1,1}$	Γ_ε	Γ_{ε^2}
$W = A + 2B$ С.ф. γ_1	$W = A - B$ С.ф. γ_ε	$W = A - B$ С.ф. γ_{ε^2}

(23)

§ 3

После того, как по изложенному выше методу будут определены спектральные термы атома в предположении сферически симметричных электронов, можно рассчитать и изменения, вносимые в схему термов в случае, когда взаимодействием собственно магнитных моментов электрона с движением электронов уже нельзя пренебречь. Сначала мы проведем эти расчеты для объяснения мультиплетной структуры, т. е. того факта, что собственные магнитные моменты электронов выстраиваются всегда «параллельно» или «антипараллельно».

Собственные функции полной системы, состоящей из электронов с собственным вращением, можно представить, если указанное выше взаимодействие мало, в виде произведений собственных функций, отвечающих, с одной стороны, движению центра тяжести, а с другой — движению магнитных моментов. Когда одному значению энергии соответствуют несколько собственных функций движения центра тяжести — как это иногда бывает согласно проведенным выше расчетам даже при учете взаимодействия — то полная собственная функция может быть представлена линейными комбинациями произведений собственных функций центра тяжести и магнитного момента.

Собственные функции полной системы должны быть антисимметричными относительно электронов. Возьмем невозмущенную систему, в которой взаимодействие магнитных моментов с движением центра тяжести отсутствует, и подсчитаем в этой невозмущенной системе ориентации магнитных моментов относительно произвольно выбранного направления. Энергию взаимодействия между магнитными моментами и электронами будем рассматривать как возмущение, для которого средняя по времени энергия, взятая по движению центров тяжести электронов, определяет вековое движение магнитных моментов. *Энергия возмущения симметрична относительно электронов.* Далее, поскольку собственная функция полной системы должна быть антисимметричной, указанная выше *усредненная по времени энергия* возмущения также должна быть *симметричной* относительно электронов. Взаимодействие между магнитным моментом некоторого электрона и остальными электронами и их магнитными моментами зависит от ориентации этого магнитного момента по отношению к направлениям, определяемым пространственными координатами всех электронов, и по отношению к ориентациям других магнитных моментов. Пусть мы теперь сообщим электронам «движение» (с разными фазами), одинаковое для всех электронов вследствие антисимметрии полной волновой функции; тогда среднее значение энергии возмущения может зависеть только, во-первых, от ориентации магнитного момента относительно общего направления, заданного движением центра тяжести электронов — в атоме это может быть только направление полного момента импульса электронов, в двухатомных молекулах возможно направление линии, соединяющей ядра — и, во-вторых, от относительной ориентации магнитных моментов. На первый взгляд создается впечатление, что окончательная ориентация магнитных моментов как будто зависит от соотношения между этими двумя частями усредненной энергии возмущения. Однако это не так. Напротив, независимо от этого соотношения вращательные моменты магнитов s_i устанавливаются по отношению к квантованному моменту s всегда по обычному структурному правилу,

т. е. «параллельно» или «антипараллельно». В этом нетрудно убедиться, рассматривая несколько упрощенную механическую задачу. Вместо взаимодействия, зависящего от направления полного момента импульса электронов l, мы введем внешнюю силу; составим функцию Гамильтона аддитивно из двух частей, из которых первая соответствует действию внешней силы, а вторая представляет взаимодействие между магнитными моментами, зависящее только от их взаимной ориентации. Однако в исходной задаче о возмущении функция Гамильтониана не складывается аддитивно из этих двух частей. Правда, взаимодействие магнитных моментов с движением центра тяжести полностью соответствует тому, что здесь названо внешней силой. Однако (усредненное) взаимодействие магнитных моментов зависит одновременно как от их взаимной ориентации, так и от ориентации относительно оси l. Тем не менее легко видеть, что, если сделанное выше утверждение о сложении s_i правильно в случае аддитивности указанных частей, то оно будет верным и в общем случае.

Перейдем теперь к квантовомеханическому решению нашей упрощенной задачи.

В «невозмущенной» системе, в которой взаимодействие между магнитными моментами не учитывается, каждый магнитный момент имеет две возможных проекции $m_s = \pm 1/2$ на внешнюю осесимметричную силу; этим двум проекциям отвечают две собственные функции $S^4(\xi_4)$, которые мы для простоты будем обозначать α и β. Номер электрона, от переменных которого зависят соответствующие собственные функции, мы будем применять в качестве индекса: $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$; $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_n$. В невозмущенной системе существует вырождение в том смысле, что все состояния, принадлежащие заданному значению $\sum m_s$, т. е. заданному значению полного момента импульса относительно оси внешнего поля, обладают одинаковой энергией; действительно, при заданном числе магнитных моментов n значение $m = \sum m_s$ дает числа состояний с собственными функциями α и β, т. е. n_α и n_β:

$$n_\alpha + n_\beta = n; \quad \frac{1}{2}(n_\alpha - n_\beta) = m. \tag{24}$$

Такой же вывод в случае $s > 1/2$ был бы уже невозможен. *Существование мультиплетной структуры сложных спектров связано с частным значением* $s = 1/2$. Внешняя сила не накладывает на невозмущенную задачу никакого другого условия, кроме того, что квантованию должна подвергаться сумма $\sum\limits_n m_s = m$, и это условие не противоречит также высокой энергии взаимодействия электронных магнитных моментов. Наоборот, истинное расщепление систем с первоначально одинаковой энергией — их число равно $\frac{n!}{n_\alpha! n_\beta!}$ — на системы с различной энергией вследствие их очень слабого взаимодействия совершенно не зависит от внешней силы, т. е. оно соответствует параллельной и антипараллельной ориентации магнитных моментов.

Указанное здесь вырождение при исчезающем взаимодействии полностью аналогично вырождению, рассмотренному в § 2, и потому оно может быть названо резонансным вырождением. Однако роль соответствующих ему резонансных колебаний здесь выполняет простая прецессия векторов s_i вокруг оси s полного вращательного момента системы магнитных моментов. Поэтому термин «резонанс» здесь уже нельзя связывать с представлением о сложной взаимной игре в движениях магнитных моментов.

Приведем еще некоторые формулы для фактического вычисления собственных функций, принадлежащих упомянутым выше мультиплетам. Энергия взаимодействия каких-нибудь двух магнитных моментов, например 1 и 2, представляется в виде матрицы, содержащей диагональные члены и пары членов, соответствующие перестановкам электронов. Другими словами: для двух электронов существуют

четыре состояния, которые характеризуются следующей таблицей:

	I	II	III	IV
m_1	1/2	1/2	−1/2	−1/2
m_2	1/2	−1/2	1/2	−1/2

Так как матрица взаимодействия зависит только от *относительной* ориентации 1 и 2, то она содержит лишь переходы при постоянном значении m, т. е. только переходы из II в III. Далее, имеем $H_{\mathrm{I,I}} = H_{\mathrm{IV,IV}} = a$; $H_{\mathrm{II,II}} = H_{\mathrm{III,III}} = b$; $H_{\mathrm{III,II}} = H_{\mathrm{II,III}} = c$. Между этими тремя постоянными существует еще соотношение

$$a = b + c. \tag{25}$$

В этом легко убедиться при рассмотрении задачи двух электронов. Полная энергия системы W (в отсутствие внешних сил) в состоянии $m = 1$ (а значит, $m_1 = m_2 = 1/2$), очевидно, равна $H_{\mathrm{I,I}} = a$ (собственная функция $\alpha_1\alpha_2$), аналогично в состоянии $m = -1$ ($m_1 = m_2 = -1/2$) имеем $H_{\mathrm{IV,IV}} = a$ (собственная функция $\beta_1\beta_2$). В состоянии $m = 0$ существует вырождение, которое по известным методам приводит к уравнению

$$\mathbf{W} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{S}$$

и к определителю

$$\begin{vmatrix} W - H_{\mathrm{II,II}} & -H_{\mathrm{II,III}} \\ -H_{\mathrm{III,II}} & W - H_{\mathrm{III,III}} \end{vmatrix} = 0. \tag{26}$$

Имеем

$$(W - b)^2 = c^2, \quad W = b + c, \quad W = b - c.$$

Состояние, для которого $W = b + c$, имеет собственную функцию $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 + \alpha_2\beta_1)$; эта функция симметрична по электронам 1 и 2 и поэтому принадлежит триплетной системе. Состояние с $W = b - c$ имеет собственную функцию $\frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha_1\beta_2 - \alpha_2\beta_1)$ и образует синглетную систему. До тех пор, пока на магнитные моменты не действуют внешние силы, три состояния триплета имеют одинаковую энергию, так что $a = b + c$. В следующих вычислениях мы будем всегда выражать b через a и c.

Рассмотрим теперь для примера случай трех электронов с собственным магнитным моментом, помещенных во внешнее силовое поле и взаимодействующих между собой. Существует невырожденное состояние с $m = 3/2$. Для энергии внешнего поля по отношению к магнитному моменту электрона при $m_s = 1/2$ и $m_s = -1/2$ мы введем обозначения K_α и K_β, соответственно. Тогда энергия в состоянии $m = 3/2$ будет $3K_\alpha + 3a$, собственная функция $\alpha_1\alpha_2\alpha_3$. В состоянии $m = 1/2$ существует трехкратное вырождение, характеризуемое тремя собственными функциями $\alpha_1\alpha_2\beta_3$, $\alpha_3\alpha_1\beta_2$, $\alpha_2\alpha_3\beta_1$, которым принадлежит одна и та же энергия. Внешнему полю отвечает энергия $2K_\alpha + K_\beta$. Вводя обозначение $X = W - 2K_\alpha - K_\beta - a - 2b = W - 2K_\alpha - K_\beta - 3a + 2c$, мы получаем определитель

$$\begin{matrix} (123) \\ (231) \\ (312) \end{matrix} \begin{vmatrix} X & -c & -c \\ -c & X & -c \\ -c & -c & X \end{vmatrix}. \tag{27}$$

Решение гласит:

$$
\begin{aligned}
&X_1 = 2c; \quad \text{собственная функция} \\
&\qquad \delta_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + \alpha_2\alpha_3\beta_1 + \alpha_3\alpha_1\beta_2), \\
&X_2 = X_3 = -c; \quad \text{собственные функции} \\
&\qquad \delta_\varepsilon = \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + \varepsilon\alpha_2\alpha_3\beta_1 + \varepsilon^2\alpha_3\alpha_1\beta_2).
\end{aligned}
\tag{28}
$$

Здесь ε означает один из двух простых корней уравнения $\varepsilon^2 = 1$. Решению X_1 соответствует симметричная по всем электронам собственная функция и потому та же система термов, как в решении $m = 3/2$, $\alpha_1\alpha_2\alpha_3$. Энергия W здесь дается равенством

$$W = 2K_\alpha + K_\beta + 3a.$$

В отсутствие внешней силы отсюда получается энергия состояния $m = 3/2$. Проведя аналогичные вычисления для $m = -1/2$ и $m = -3/2$, мы получаем для энергии результат, указанный в следующей таблице.

	Квартетная система	Две дублетных системы
$m = 3/2$ $m = 1/2$ $m = -1/2$ $m = -3/2$	$W = 3a + \begin{cases} 3K_\alpha \\ 2K_\alpha + K_\beta \\ K_\alpha + 2K_\beta \\ 3K_\beta \end{cases}$	$W = 3a - 3c + \begin{cases} 2K_\alpha + K_\beta \\ K_\alpha + 2K_\beta \end{cases}$

(29)

Две дублетные системы являются вырожденными, так как значения энергии для них одинаковы. Разбиение на δ_ε-системы, т. е. на квартеты и дублеты, совершенно аналогично разбиению на Г-системы в (29). Квартеты и дублеты друг с другом не комбинируют.

Вычисление магнитных собственных функций и мультиплетной структуры для случая более чем трех электронов производится проще всего по методам § 2. Число различных имеющихся мультиплетов при заданном числе электронов n можно легко определить по обычному правилу структуры. Именно, в соответствии с формулами (24) число термов при некотором заданном значении m есть

$$\frac{n!}{n_\alpha! n_\alpha!} = \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}+m\right)!\left(\frac{n}{2}-m\right)!}. \tag{30}$$

Таким образом, имеем всегда

$$\frac{n!}{\left(\frac{n}{2}+m\right)!\left(\frac{n}{2}-m\right)!} - \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}+m+1\right)!\left(\frac{n}{2}-m-1\right)!} = \frac{n!(2m+1)}{\left(\frac{n}{2}+m+1\right)!\left(\frac{n}{2}-m\right)!}. \tag{31}$$

Мультиплеты имеют мультиплетность $2m$, причем m принимает целые или полуцелые значения, соответственно значениям $n/2$. Разные мультиплеты одной мультиплетности всегда имеют одинаковую энергию при жестко фиксированных положениях центров тяжести электронов.

В атоме магнитные моменты электронов ориентируются не по внешней силе, а по оси полного орбитального момента электронов l. Но если атом попадает, например, в сильное внешнее магнитное поле — мы имеем ввиду, следовательно, случай эффекта Пашена—Бака — то магнитные моменты ориентируются по отношению к этому внешнему полю. В этом предельном случае собственные функции

всего атома можно представить в виде произведений или сумм произведений собственных функций координат центров тяжести электронов на собственные функции магнитных моментов.

Приведем еще полное разбиение на термы для задачи трех электронов с учетом взаимодействия между их магнитными моментами. Тогда, умножая решения, полученные в §2 (уравнения (22)), на решения, полученные в этом параграфе, следует образовать комбинации, антисимметричные по номерам электронов.

	Энергия	Собственная функция	
Эквивалентных электронов нет, т. е. m, l, p различны	Квартетная система: $W = A - B - C - D$	$\delta_1 \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\gamma_1^{\mathrm{I}} - \gamma_1^{\mathrm{II}}\right)$	(32)
	1-я дублетная система: $W = A - R$	$\frac{1}{2}\left\{\delta_\varepsilon\left(e^{-i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{I}} - e^{i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{II}}\right) + \delta_{\varepsilon^2}\left(e^{i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{I}} - e^{-i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{II}}\right)\right\}$	
	2-я дублетная система: $W = A + R$	$\frac{1}{2}\left\{\delta_\varepsilon\left(e^{-i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{I}} + e^{i\varphi}\gamma_{\varepsilon^2}^{\mathrm{II}}\right) - \delta_{\varepsilon^2}\left(e^{i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{I}} + e^{-i\varphi}\gamma_\varepsilon^{\mathrm{II}}\right)\right\}$	
Два электрона «эквивалентны», т. е. $l = m$	Дублетная система: $W = A - B$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\delta_\varepsilon\gamma_{\varepsilon^2} - \delta_{\varepsilon^2}\gamma_\varepsilon\right)$	

Значения энергии приведены здесь в пренебрежении взаимодействием между собственными магнитными моментами электронов. Совершенно таким же способом можно рассматривать все атомы, содержащие в заполненных оболочках все свои электроны, кроме трех. Собственные функции полной задачи в этом случае представляются не в виде произведений, а в виде сумм произведений собственных функций §2 и уравнения (28). Это имеет место всегда в тех случаях, когда собственные функции разных систем Г дают равные значения энергии.

По поводу сравнения таблицы (32) с данными эксперимента следует прежде всего подчеркнуть, что значения термов для различных мультиплетов отличаются на величину резонансного взаимодействия. *Терм наивысшей мультиплетности принимает наименьшее значение*, потому что величины B, C, D как в теории спектра гелия, так и в общем случае являются положительными. Как показывает опыт, терм наивысшей мультиплетности при равных числах электронов занимает самое нижнее положение, и это будет показано здесь для общего случая без каких-либо затруднений. Ведь в совершенно общем случае терму наивысшей мультиплетности соответствует симметричная собственная функция всех электронных магнитных моментов, если собственные функции $l, m, \ldots, p$ различны. (Например, максимальному значению $m = n/2$ соответствует единственная собственная функция $\alpha_1\alpha_2\ldots\alpha_n$.) Значит, собственная функция задачи сферически симметричных электронов, на которую надлежит умножать собственную функцию магнитных моментов, должна быть обязательно антисимметричной. В соответствующее ей значение энергии все резонансные члены всегда входят со знаком минус (см. часть I, уравнения (19)), и поэтому оно меньше всех других значений энергии. Если некоторые электроны находятся в заполненных оболочках, то только что приведенный аргумент все-таки остается справедливым для остальных электронов, поскольку тогда можно пренебречь резонансом с заполненными оболочками.

К рассмотрению таблицы (32) следует еще заметить, что относительная интенсивность комбинаций между дублетной и квартетной системой в атоме, как и в задаче о гелии, определяется в конце концов отношением ширины мультиплета к расстоянию между различными мультиплетами. Напротив, комбинации различных дублетных систем друг с другом имеют нормальную интенсивность.

13 Зак. 6

§ 4

В предыдущих разделах мы рассматривали движение центров тяжести и магнитных моментов электронов вначале раздельно и потом находили решения полной задачи об атоме в виде суперпозиции полученных ранее решений. С целью всестороннего изучения поставленной задачи было бы полезно пройти этот путь и в обратном направлении, начиная с атома, содержащего магнитные электроны.

Мы возьмем в качестве исходного пункта случай сильных внешних полей, причем взаимодействием между разными электронами полностью будем пренебрегать. Тогда каждый электрон сам по себе находится в стационарном состоянии. Поскольку взаимодействие электронных магнитных моментов с движением центра тяжести в общем мало, то собственную функцию одного электрона можно представить в общем случае в виде произведения по формуле (6). Мы опять подразумеваем под $l, m, \ldots p$ те части собственной функции, которые отвечают движению центра тяжести, и под α и β те части, которые соответствуют электронным магнитным моментам. Тогда полная собственная функция, например, первого электрона будет иметь вид $l_1\alpha_1$. Если взаимодействие магнитных моментов с движением центра тяжести не мало, то представление в виде произведения будет уже невозможным, и тогда мы введем для этой функции обозначение l_1^α.

В этом последнем случае невозмущенная система является невырожденной; антисимметричная собственная функция, которую следует выбрать в качестве решения, дается соответствующим определителем, например

$$\begin{vmatrix} l_1^\alpha & m_1^\alpha & \ldots & p_1^\beta \\ l_2^\alpha & m_2^\alpha & \ldots & p_2^\beta \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_n^\alpha & m_n^\alpha & \ldots & p_n^\beta \end{vmatrix}. \tag{33}$$

Мы введем для этого определителя сокращенное обозначение

$$\begin{array}{c|cccc} & l^\alpha & m^\alpha & \ldots & p^\alpha \\ \hline 1 & & & & \\ 2 & & & & \\ \vdots & & & & \\ n & & & & \end{array}$$

Если же взаимодействием магнитных моментов с движением центров тяжести электронов можно пренебрегать (т. е. если расщепление внутри мультиплета мало по сравнению с расстоянием между разными мультиплетами), то невозмущенная система будет вырожденной и в случае сколь угодно больших внешних сил. Действительно, ориентации магнитных моментов «α» и «β» можно распределить по положениям электронов $l, m, \ldots$ произвольным образом. Поэтому здесь появляется рассмотренное в § 3 вырождение задачи о магнитных моментах, в результате которого имеет место разбиение на мультиплеты. Если все собственные функции $l, m, \ldots, p$ различны, то число определителей, соответствующих одному значению энергии невозмущенной задачи, дается формулами (24), а число существующих при этом мультиплетов — формулой (31). Если два из этих чисел,

например, оба первые, равны между собой, то определители

$$\begin{array}{c|cccc} & l^{\alpha} & l^{\alpha} & \ldots & p^{\beta} \\ \hline 1 & & & & \\ 2 & & & & \\ \vdots & & & & \\ n & & & & \end{array} \quad \text{и} \quad \begin{array}{c|cccc} & l^{\beta} & l^{\beta} & \ldots & p^{\beta} \\ \hline 1 & & & & \\ 2 & & & & \\ \vdots & & & & \\ n & & & & \end{array}$$

тождественно обращаются в нуль, а другие два определителя

$$\begin{array}{c|cccc} & l^{\alpha} & l^{\beta} & \ldots & p^{\beta} \\ \hline 1 & & & & \\ 2 & & & & \\ \vdots & & & & \\ n & & & & \end{array} \quad \text{и} \quad \begin{array}{c|cccc} & l^{\beta} & l^{\alpha} & \ldots & p^{\beta} \\ \hline 1 & & & & \\ 2 & & & & \\ \vdots & & & & \\ n & & & & \end{array}$$

становятся равными между собой с точностью до знака. Значит, к двум одинаковым собственным функциям электронов должны присоединяться во всяком случае разные собственные функции магнитных моментов α и β; «эквивалентные орбиты» здесь отсутствуют. Число возможных мультиплетов определяется $n-2a$ электронными магнитными моментами в смысле § 3, причем a означает количество имеющихся пар с одинаковыми $l, m, \ldots$. Одинаковые собственные функции $l, m, \ldots$ встречаются только попарно.

В вычислениях § 3 расстояния между разными мультиплетами определялись, прежде всего, слабым магнитным взаимодействием. Мультиплеты с одинаковой кратностью имели одинаковую энергию. Теперь же с самого начала расстояния между мультиплетами задаются резонансным взаимодействием электронов. Дальнейший ход вычислений определяется конкретными особенностями рассматриваемой атомной системы.

Иногда целесообразно брать вначале какой-нибудь определенный терм атома и затем исследовать состояния полной системы, которые возникают в случае, когда к этому состоянию присоединяется электрон на данной квантовой орбите. Примерный ход вычислений в этом случае приводится ниже.

Пусть исходная система содержит $n-1$ электронов и имеет антисимметричную функцию

$$U(1, 2, \ldots, n-1). \tag{34}$$

Предполагается, что всякое вырождение снято внешними полями. Эта функция соответствует некоторому значению $m = \sum\limits_{n} m_s$ в смысле § 3. Если мы возьмем положительное значение m, то в этом случае всегда найдется другое стационарное состояние с собственной функцией W, которое соответствует, например, значению $\sum\limits_{n} m_s = m - 1$ и имеет в отсутствие внешних сил и мультиплетного расщепления, такую же энергию, т. е. принадлежит тому же мультиплету.

Пусть теперь к системе присоединяется электрон с собственной функцией k_n^{β}. Пока взаимодействие этого нового электрона с атомной системой очень мало,

вырождение отсутствует. Собственная функция (антисимметричная!) полной системы имеет вид

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\left\{U(1,2,\ldots,n-1)k_n^\beta+(-1)^n U(2,3,\ldots n)k_1^\beta+(-1)^{2n}U(3,4,\ldots,n,1)k_2^\beta+\ldots\right\}. \quad (35)$$

Если же мультиплетное расщепление можно считать малым по сравнению с упомянутой энергией взаимодействия, то возникает вырождение, в котором состояние с собственной функцией

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\left\{W(1,2,\ldots,n-1)k_n^\alpha+(-1)^n W(2,3,\ldots,n)k_1^\alpha+(-1)^{2n}W(3,4,\ldots,n,1)k_2^\alpha+\ldots\right\} \quad (36)$$

принадлежит такому же значению энергии невозмущенной системы.

Задача с возмущением приводит к простому определителю второго порядка, из которого энергия расщепления вычисляется легко, если только U и W заданы. Энергия расщепления в основном соответствует резонансному взаимодействию электрона с первоначальным атомом. При этом один из двух возникающих термов принадлежит мультиплету с кратностью $r-1$, другой — мультиплету с кратностью $r+1$, если терм исходной системы принадлежал мультиплету с кратностью r.

Итак, уравнения (35) и (36) позволяют сравнительно просто находить мультиплета в атоме, если известна структура (и соответствующие ей собственные функции) его иона или же атома, занимающего предшествующее положение в периодической системе.

Проведенные здесь рассуждения имели целью дать общее представление о физических проблемах, связанных с многоэлектронными атомами, и о математических методах решения этих проблем. Предложенную здесь схему, возможно, еще нельзя считать достаточно общей. Но я хотел бы подчеркнуть, что безусловно верны следующие результаты: существует разбиение всех спектров на мультиплеты, в которых расщепление определяется взаимодействием электронных магнитных моментов с движением центра тяжести электронов (закон косинуса и пропорции интервалов!); резонансное взаимодействие обуславливает расстояния между разными мультиплетами при одинаковых квантовых числах электронов; как в гелии, системы термов при исчезающем мультиплетном расщеплении распадаются на некомбинирующие подсистемы.

III

ЭФФЕКТ РЕЗОНАНСА В ТЕОРИИ ПОЛОСАТЫХ СПЕКТРОВ

Квантовая механика внесла в теорию полосатых спектров существенное отличие от прежней квантовой теории только в том отношении, что колебательные и вращательные квантовые числа старой теории становятся теперь полуцелыми[16]. Этот результат безусловно позволяет объяснить многие наблюдаемые полосатые спектры. Однако есть и другие полосатые спектры, для которых он оказывается недостаточным.

Во многих полосах наблюдается чередование интенсивности, когда последовательные линии вращательной полосы оказываются поочередно сильными и слабыми,

[16] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 879. — Русский перевод: с. 209–228. Более подробно теория полосатых спектров развита на основе квантовой механики в работах: *Mensing L.* Zs. Phys., 1926, **36**, 814; *Halpern O.* Zs. Phys., 1926, **38**, 8; *Dennison D.* Phys. Rev. 1926, **28**, 318; *Schrödinger E.* Ann. Phys., 1926, **79**, 489; *Fues E.* Ann. Phys., 1926, **80**, 367; 1926, **81**, 281.

а в других полосах каждая вторая линия исчезает вообще[17]. Этот эмпирический факт, как известно, послужил поводом для представления термов этих полос пресловутыми четвертьцелыми квантовыми числами. Такое представление, как бы оно ни подходило для упорядочения экспериментального материала[18], все же противоречит принципу соответствия, потому что оно допускает изменения вращательного квантового числа вида $p \to p \pm 1/2$. Эти аномальные полосы наблюдались пока только в двухатомных молекулах с одинаковыми ядрами[19]. Поэтому естественно связывать чередование интенсивностей с резонансом ядер[20]. Мы рассмотрим теперь модель двухатомной молекулы с одинаковыми ядрами.

Собственную функцию общей молекулярной задачи можно представить в виде произведения четырех собственных функций, из которых первая отвечает движениям электронов, вторая — колебаниям ядер, третья — поступательному движению центра тяжести молекул и, наконец, четвертая — вращению ядер. Теперь речь пойдет опять о разбиении термов на две системы, из которых первой соответствует собственные функции, симметричные по координатам ядер, а второй принадлежат собственные функции, изменяющие знак при перестановке ядер. Первый множитель в этих собственных функциях, соответствующий движениям электронов в молекуле, был подробно исследован в работе Хунда[21]. Мы возьмем из нее результат, что, отвлекаясь от вырождения, «электронная» функция будет всегда либо симметричной, либо антисимметричной по координатам ядер. Собственная функция колебаний будет, без сомнения, симметричной по координатам ядер, так как единственной переменной, от которой она зависит, служит расстояние между ядрами. Точно таким же образом безусловно симметричной по координатам ядер будет и собственная функция, отвечающая движению центра тяжести молекулы. В качестве независимой переменной, от которой зависит вращательная собственная функция молекулы, мы выберем угол w с осью вращательного момента ядер p, т. е. угол между линией центров ядер и линией узлов — в нашем случае с какой-нибудь фиксированной прямой на плоскости, в которой вращается молекула. Вращательный момент p принимает целочисленные значения, но энергия оказывается пропорциональной $(p + 1/2)^2$ с точностью до аддитивной постоянной. Собственная функция (ненормированная), отвечающая определенному значению вращательного квантового числа p, имеет тогда вид

$$e^{ipw}. \qquad (37)$$

Перестановка ядер означает изменение угла w на π. Значит, все вращательные функции (37) с четными значениями p будут симметричны, а все функции с нечетными значениями p — антисимметричны по координатам ядер. Этот вывод можно, разумеется, проделать также с собственными функциями по Шредингеру, т. е., например, с обычными полярными углами θ, φ; вычисления тогда станут несколько

[17] *Mecke R.* Zs. Phys., 1924, **25**, 597; 1924, **28**, 261; 1925, **32**, 823; *Dieke G.* Zs. Phys., 1925, **31**, 326; 1925, **33**, 161.

[18] *Kratzer A.* Ann. Phys., 1923, **71**, 72.

[19] Мекке (*Mecke R.* Zs. Phys., 1925, **31**, 709) и Слэтер (*Slater J.C.* Nature, 1926, **117**, 555) уже предполагали, что чередование интенсивностей связано с симметрией ядер. Однако рассуждения как Мекке, так и Слэтера отличаются от наших в существенных пунктах. Исследование Слэтера согласуется с нашими в отношении связи с принципом соответствия.

[20] См. также исследование *van Vleck J. H.* Phys. Rev., 1926, **28**, 980.

[21] *Hund F.* Zs. Phys., 1927. Я обязан Хунду за возможность изучения этой работы до публикации и за обсуждение поставленной выше проблемы.

сложнее. В конце концов, мы получаем следующее разбиение на некомбинирующие системы термов.

А. Симметричная система	В. Антисимметричная система
Симметричная электронная функция и $p = 0, 2, 4, \ldots$ Симметричная электронная функция и $p = 1, 3, 5, \ldots$	Антисимметричная электронная функция и $p = 1, 3, 5, \ldots$ Антисимметричная электронная функция и $p = 0, 2, 4, \ldots$

Это разбиение соответствует разбиению термов гелия на пара- и ортосистему.

Полосы, возникающие при комбинировании этих термов, существенно отличаются от обычных спектральных полос прежде всего в следующем отношении. При определенном электронном переходе существует или только нулевая ветвь ($p \to p$) или только P и Q-ветви ($p \to p \pm 1$). Первый случай имеет место, когда электронный переход происходит между двумя однородными термами (симметричный $\leftrightarrow$ симметричный или антисимметричный $\leftrightarrow$ антисимметричный), второй — когда переход происходит между двумя разнородными термами (симметричный $\leftrightarrow$ антисимметричный).

Для дальнейшего обсуждения мы будем рассматривать различные случаи. Сначала предположим, что ядра сферически симметричны, т. е. кроме рассмотренных здесь степеней свободы не имеют никаких других степеней свободы и, например, не обладают собственным вращением. Тогда обе изображенные выше системы никоим образом не комбинируют друг с другом, и по аналогии со статистикой электронов и световых квантов пришлось бы предполагать, что в природе встречается только одна из двух систем термов. Для полноты аналогии между статистикой протонов и статистикой электронов следовало бы иметь в виду в первую очередь антисимметричную систему B. Однако утверждать это с уверенностью нельзя, и для последующих рассуждений несущественно, какая из систем будет выбрана. Если существует только одна из двух систем, то при комбинировании термов возникают вращательные полосы, из которых каждая вторая линия выпадает. Если, например, окончательное решение дает антисимметричная система, то переходу от симметричной электронной функции к антисимметричной соответствует только нулевая ветвь с переходами... $5 \to 5, 3 \to 3, 1 \to 1$. Аналогичная ситуация наблюдается в полосах гелия и кислорода, и можно полагать, по-видимому, что ядра гелия (атомный вес 4) и кислорода (атомный вес 16), будучи особенно устойчивыми, «замкнутыми» образованиями, не обладают собственным вращением. Исключение одного из двух решений, т. е. сокращение статистических весов вдвое, как известно, играет существенную роль также при статистическом вычислении химических постоянных.

Предположим теперь второй случай, когда оба ядра рассматриваемой молекулы обладают собственным вращением с величиной $s = 1/2$, как у электронов, и предположим также, что окончательным решением должна быть антисимметричная система. Тогда указанная выше схема термов будет полностью аналогична схеме термов гелия[22]. Будут существовать обе системы А и В (орто- и парасистема); они будут допускать совсем слабые перекрестные комбинации. В системе (А) магнитные моменты ядер устанавливаются антипараллельно, в другой системе (В) — параллельно. Поэтому все термы системы В имеют статический вес 3, а термы системы (А) — статистический вес 1. Следовательно, в некоторых полосах — например, в нулевой ветви, принадлежащей переходу: симметричная $\leftrightarrow$ симметричная электронная функция — будут присутствовать все линии; однако линии... $5 \to 5, 3 \to 3, 1 \to 1$ будут втрое интенсивнее (отвлекаясь от зависимости интенсивности от других

[22] За указание на это обстоятельство я благодарю Ф. Хунда.

факторов, например, температуры и т.д.), чем линии... $4 \to 4, 2 \to 2, 0 \to 0$. Если вращательный момент s будет больше $1/2$, то отношение статистических весов двух систем термов будет приближаться к единице.

Такие случаи чередования интенсивностей, по-видимому, реализуются на опыте для N_2^+ и, может быть, также для H_2 [23]. По-видимому, можно полагать, что ядро азота (3 ядра гелия + 2 ядра водорода + 1 электрон) и ядро водорода сами обладают собственным вращением.

Чередование интенсивностей несколько другого рода будет происходить, если ядра, хотя и не имеют никаких других степеней свободы, но относятся к различным изотопам, т.е. представляют собой ядра различного вида с одинаковым зарядом. Тогда все молекулы, в которых содержатся различающиеся ядра, будут испускать обыкновенные полосатые спектры, а спектры всех других молекул будут иметь полосы описанного выше типа, с выпадением каждой второй линии. Наблюдаемое в целом чередование интенсивностей тогда будет зависеть от соотношения изотопов в смеси. Экспериментально такой случай, по-видимому, не обнаружен.

Проведенное здесь рассмотрение по методам главы 2, § 2 может быть легко распространено на случай многоатомных молекул с одинаковыми атомами. Правда, такое исследование ввиду необозримости экспериментального материала пока что представляет только теоретический интерес. Поскольку, однако, примененные в главе 2, § 2 группы подстановок имеют для молекул более наглядный и конкретный смысл, мы рассмотрим здесь один частный пример.

Представим себе трехатомную молекулу, состоящую из трех одинаковых атомов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника (рис. 1). Далее мы рассмотрим ради простоты только собственные функции электронов, симметричные по ядрам.

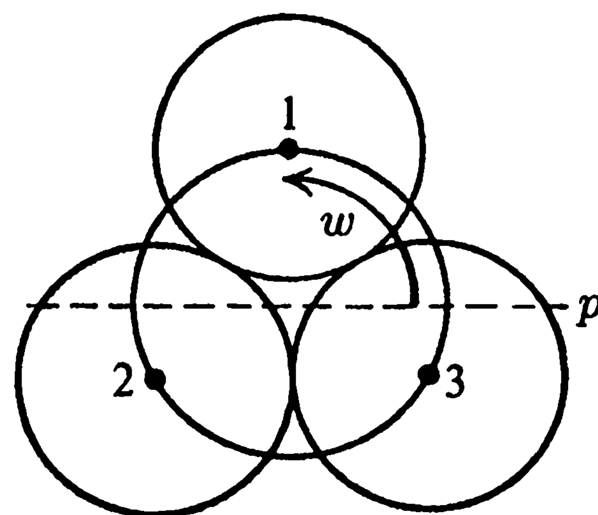


Рис. 1

Собственные функции поступательного движения и колебаний всегда симметричны относительно ядер; мы рассмотрим прежде всего вращения в плоскости молекулы. Пусть вращательный момент молекулы будет p и соответствующая собственная функция снова e^{ipw}, где w, как и выше, означает угол с осью p. Тогда в соответствии с главой 2, § 2 будут существовать три некомбинирующие системы термов Γ_1, Γ_ε, Γ_{ε^2} ($\varepsilon = e^{2\pi i/3}$), которые обладают тем свойством, что их собственные функции умножаются на 1, или ε, или ε^2, когда к этим собственным функциям применяется подстановка (1 2 3).

Циклическая подстановка (1 2 3) означает точно поворот молекулы на $2\pi/3$, т.е. приращение w на $2\pi/3$. Далее существуют состояния молекулы, в которых последовательность атомов на схеме рис. 1 будет не 1 2 3, а 1 3 2. В одном случае подстановка (1 2 3) означает поворот на $4\pi/3$. Термы полос для этой конфигурации также можно разбить на три системы Γ_1, Γ_ε, Γ_{ε^2} и в заключение в полной аналогии с таблицей (22), мы получаем:

Γ_1	Γ_ε	Γ_{ε^2}
Конфигурация 1 2 3 $p \equiv 0 \pmod 3$	Конфигурация 1 2 3 $p \equiv 1 \pmod 3$	Конфигурация 1 2 3 $p \equiv 2 \pmod 3$
Конфигурация 1 3 2 $p \equiv 0 \pmod 3$	Конфигурация 1 3 2 $p \equiv 2 \pmod 3$	Конфигурация 1 3 2 $p \equiv 1 \pmod 3$

(38)

[23] *Dieke G.* Versl. Amsterdam, 1924, **33**, 390.

Как и в таблице (22), каждому терму системы Γ_ε соответствует терм системы Γ_{ε^2} с равной энергией; энергия[24] здесь пропорциональна p^2. Если предположить, что ядра точечносимметричны, то остается только симметричное либо антисимметричное решение, так что реализуются только термы системы Γ_1, и мы получаем вращательные полосы, в которых действительно имеется только каждая *третья* линия, а две промежуточные линии всегда выпадают. Если предполагать и существование у ядер дальнейших степеней свободы, то картина чередования интенсивностей соответственно усложняется.

В этих рассуждениях существенно ничего не изменится, если рассматривать самое общее вращательное движение трехатомной треугольной молекулы. Угол w остается циклической координатой, а p — постоянной величиной. Добавляется еще одно вращательное квантовое число, которое соответствует полному вращательному моменту молекулы; полосы, порождаемые им, просто накладываются на рассмотренные выше полосы.

Выше мы все время говорили о резонансе ядер; это было оправдано ввиду аналогии с рассуждениями главы 2, § 2. Однако и здесь под термином «резонанс» нельзя понимать сложное колебательное движение; правда, ядра движутся по одинаковым орбитам (в различной фазе) и меняют место с некоторой колебательной частотой. Но это происходит просто вследствие вращения и роль колебательной частоты здесь играет частота вращения. Это соображение позволяет также просто объяснить парадокс, который мог бы привести к трудностям в понимании разбиения термов. Сначала кажется странным, что простые вращения, при которых ядра, конечно, движутся по «эквивалентным» орбитам, возможны также (для точечно симметричных ядер) в пределах антисимметричной системы, в которой «эквивалентные орбиты» ядер существовать не могут. Решение этой трудности состоит в том, что термин «эквивалентные орбиты» на самом деле определен выше лишь для предельного случая исчезающего взаимодействия. Если мы закрепим ядра дополнительной силой в фиксированной точке и затем адиабатически снимем взаимодействие, то вращательные движения с антисимметричной собственной функцией вовсе не перейдут в «эквивалентные движения» двух ядер. Выбор антисимметричной системы здесь не может быть естественным образом обоснован требованием несуществования эквивалентных орбит.

Эмпирический материал для проверки сделанных здесь выводов имеется пока что только для полос в спектрах двухатомных молекул. Можно надеяться, что при детальном анализе этого эмпирического материала с точки зрения резонанса ядер будут сделаны важные заключения о свойствах ядер.

Копенгаген, Институт теоретической физики

---

[24] См. *Dennison D.* Phys. Rev. 1926, **28**, 318.

О НАГЛЯДНОМ СОДЕРЖАНИИ КВАНТОВОТЕОРЕТИЧЕСКОЙ КИНЕМАТИКИ И МЕХАНИКИ*

В настоящей работе сначала даются точные определения понятий: положение (координаты), скорость, энергия и т. д. (например, для электрона); эти определения остаются справедливыми и в классической механике; показывается, что одновременное измерение канонически сопряженных величин возможно лишь с некоторой характеристической неточностью (§ 1). Непосредственная причина появления в квантовой механике статистических закономерностей кроется именно в этой неточности. Математическую формулировку для нее удается получить с помощью теории Дирака—Иордана (§ 2). Полученные таким образом принципы применяются для рассмотрения макроскопических явлений с точки зрения квантовой механики (§ 3). Теория поясняется некоторыми частными мысленными экспериментами (§ 4).

Мы думаем, что физическая теория понятна и наглядна тогда, когда мы можем представлять себе ее качественные следствия для эксперимента во всех простых случаях, и вместе с тем тогда, когда мы уже убедились в том, что применение теории не приводит к внутренним противоречиям. Например, мы думаем, что идея Эйнштейна о замкнутом трехмерном мире понятна и наглядна, так как мы можем мысленно представить себе без противоречий ее последствия для эксперимента. Правда, эти следствия из нее противоречат нашим привычным представлениям о пространстве и времени. Однако мы можем убедиться в том, что возможность применения этих привычных представлений о пространстве и времени к очень большим областям пространства не обоснована ни законами нашего мышления, ни опытом. Наглядное истолкование квантовой механики пока еще полно внутренних противоречий, которые отражаются в борьбе мнений в вопросе о дискретности и континууме, частицах и волнах. Уже отсюда можно сделать вывод о том, что истолкование квантовой механики с помощью обычных понятий кинематики и механики абсолютно невозможно. Ведь квантовая механика возникла как раз из попытки порвать с этими обычными понятиями кинематики и поставить на их место соотношения между конкретными числами, полученными экспериментально. Поскольку эта попытка, по-видимому, оказалась удачной, то и математическая схема квантовой механики, со своей стороны, не нуждается в пересмотре. Не требуется также пересматривать пространственно-временную геометрию для малых областей пространства-времени, так как, выбирая достаточно тяжелые массы, мы можем сделать квантовомеханические законы как угодно близкими к классическим законам, даже если речь идет о еще более малых областях пространства и времени. Однако то обстоятельство, что понятия кинематики и механики пересматривать необходимо, следует, по-видимому, прямо из основных уравнений квантовой механики. Если дана некоторая определенная масса m, то по нашим обычным

* Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. — Zs. Phys., 1927, **43**, 172–198. *Перевод А. А. Сазыкина.*

представлениям имело бы простой и понятный смысл говорить о положении (координате) и скорости центра тяжести этой массы m. Однако в квантовой механике между массой, координатой и скоростью должно существовать соотношение $\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = h/2\pi i$. Поэтому мы с полным основанием можем питать подозрения к некритическому употреблению слов «координата» и «скорость». Если согласиться с тем, что типичной чертой процессов в очень малых областях пространства и времени является та или иная дискретность, то в несостоятельности понятий «координата» и «скорость» можно убедиться даже непосредственно. Если, например, мы представим себе одномерное движение материальной точки, то в теории континуума можно нарисовать непрерывную кривую $x(t)$ (рис. 1), изображающую траекторию частицы (точнее, ее центра тяжести); касательная к этой кривой будет

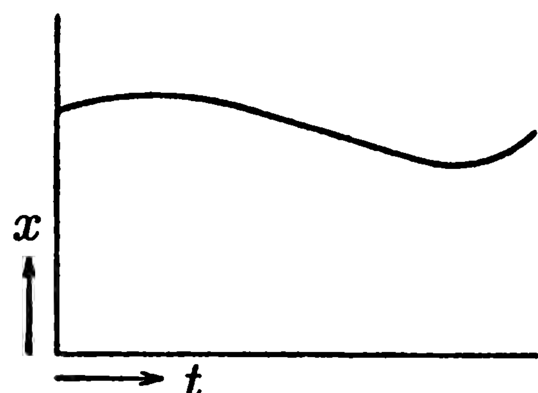


Рис. 1

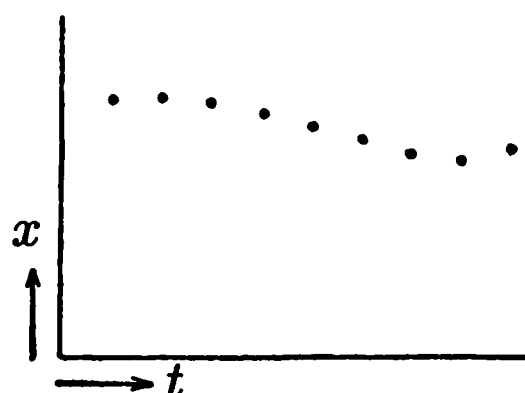


Рис. 2

давать скорость частицы. Напротив, в дискретной теории вместо этой непрерывной кривой появится ряд точек, разделенных друг от друга конечными промежутками (рис. 2). В этом случае, очевидно, говорить о скорости в некотором определенном положении бессмысленно, ибо скорость может быть определена только двумя точками, а отсюда, в свою очередь, следует, что каждой точке принадлежат две разных скорости.

Поэтому возникает вопрос, возможно ли при более точном анализе указанных кинематических и механических понятий устранить противоречия, существующие до сих пор в наглядном истолковании квантовой механики, и возможно ли достичь наглядного понимания квантовомеханических соотношений [1)].

§ 1

Понятия: координата, траектория (орбита), скорость, энергия

Для того, чтобы можно было следить за квантовомеханическим поведением какого-нибудь предмета, необходимо знать массу этого предмета и силы взаимодействия с какими-нибудь полями и другими предметами. Только тогда можно составить гамильтонову функцию квантовомеханической системы. Следующие ниже соображения в общем относятся к нерелятивистской квантовой механике, поскольку законы квантовотеоретической электродинамики известны пока еще далеко

[1)] Данная работа возникла благодаря стремлениям и желаниям, которые были отчетливо выражены другими исследованиями уже много раньше, до создания квантовой механики. Я особенно вспоминаю здесь работы Бора об основных постулатах квантовой теории (например, Zs. Phys., 1923, **13**, 117) и дискуссии Эйнштейна по вопросу о связи между волновым полем и световыми квантами. В новейшее время обсуждаемые здесь проблемы яснее всего рассмотрены В. Паули, частично ответившим на возникшие вопросы (*Pauli W.* Quantentheorie. Handbuch der Physik. Bd. 23. H. Geiger und K. Scheel (Hrsg.). Berlin, Springer—Verlag, 1926. — Русский перевод: *Паули В.* Труды по квантовой теории. М.: Наука, 1975); в формулировке этих проблем квантовая механика, как показано Паули, произвела лишь незначительные изменения. Мне доставляет особую радость поблагодарить здесь В. Паули за многократное стимулирование в совместных устных и письменных дискуссиях, которые внесли существенный вклад в эту работу.

не полностью[2]. Каких-либо дальнейших высказываний о «виде» предмета не требуется, и словом «вид» целесообразнее всего называть совокупность упомянутых выше сил взаимодействия.

Если мы хотим внести ясность в то, что следует понимать под словами «координата предмета», например, координата электрона (в некоторой заданной системе отсчета), то мы должны сделать определенные эксперименты, с помощью которых можно измерить эту «координату электрона»; иначе эта слова не имеют смысла. В подобных экспериментах, которые позволяют измерять «координату электрона» в принципе даже совершенно точно, недостатка не имеется, например: пусть мы осветим электрон и рассмотрим его под микроскопом. Наивысшая достижимая точность определения координаты определяется здесь в основном длиной волны используемого света. В принципе мы могли бы построить, например, микроскоп на γ-лучах и измерить с его помощью координаты настолько точно, насколько мы этого пожелаем. Однако, при таком определении оказывается существенным побочное обстоятельство: эффект Комптона. Всякое наблюдение света, рассеянного электроном, предполагает использование фотоэлектрического эффекта (в глазе, на фотопластинке, в фотоэлементе), и поэтому оно может быть также истолковано следующим образом: квант света падает на электрон, отражается от него или претерпевает на нем дифракцию и затем после еще одного отклонения линзами микроскопа вызывает фотоэффект. В момент определения координаты, т. е. в момент, когда квант света дифрагирует на электроне, электрон изменяет свой импульс скачкообразно. Это изменение тем больше, чем меньше длина волны используемого света, т. е. чем точнее определяется координата. Поэтому в тот момент, когда координата электрона известна, его импульс может быть известен только с точностью до величины, соответствующих указанным скачкообразным изменениям; таким образом, чем точнее определена координата, тем с меньшей точностью известен импульс и наоборот; в этом мы видим непосредственное наглядное объяснение соотношения $\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = h/2\pi i$. Пусть q_1 будет точность, с которой известно значение q (q_1 примерно равна средней ошибке q), т. е. здесь длина волны света, p_1 — точность, с которой определяется p, т. е. здесь величина скачкообразного изменения p при эффекте Комптона; тогда в соответствии с элементарными формулами эффекта Комптона p_1 и q_1 связаны соотношением

$$p_1 q_1 \sim h. \qquad (1)$$

Тот факт, что соотношение (1) непосредственно связано математически с перестановочным соотношением $\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = h/2\pi i$, будет показан позднее. Здесь следует указать на то, что уравнение (1) точно выражает факты, которые ранее пытались описывать с помощью разбиения фазового пространства на ячейки размером h.

Для определения положения электрона можно также предпринимать другие эксперименты, например, опыты со столкновениями. Для точного измерения координаты требуются столкновения с очень быстрыми частицами, так как в случае медленных электронов точному определению координаты препятствуют дифракционные явления, которые по Эйнштейну связаны с волнами де Бройля (см., например, эффект Рамзауэра). Таким образом, при точном измерении координаты импульс электрона опять изменяется скачкообразно, и простая оценка точности по формулам для волн де Бройля снова дает соотношения (1).

Этой дискуссией понятие «положение (координата) электрона» определено, по-видимому, достаточно ясно, и еще остается прибавить лишь несколько слов

[2] Недавно в этой области были достигнуты большие успехи благодаря работам П. Дирака (*Dirac P.* Proc. Roy. Soc., 1927, **A 114**, 243 и последующие работы).

о «величине» электрона. Если две очень быстрых частицы попадают на электрон поочередно через очень короткий интервал времени Δt, то положения электрона, определенные этими двумя частицами, будут находиться друг от друга на очень близком расстоянии Δl. Из законов, которые наблюдаются для α-частиц, мы заключаем, что Δl можно уменьшить до величин порядка 10^{-12} см, если только выбрать достаточно малый интервал Δt и взять достаточно быстрые частицы. Значит, мы можем сказать, что электрон — это частица, радиус которой не более 10^{-12} см.

Теперь мы переходим к понятию «траектория электрона». Под траекторией мы понимаем последовательность точек пространства, (в некоторой заданной системе отсчета), которые электрон поочередно занимает в качестве своих «координат». Поскольку мы уже знаем, что следует понимать под «координатой в некоторый определенный момент времени», новых трудностей здесь не возникает. Тем не менее легко видеть, что часто употребляемая фраза «$1S$-орбита электрона в атоме водорода» с нашей точки зрения смысла не имеет. Ведь для того, чтобы измерить эту $1S$-«орбиту», следовало бы осветить атом излучением с длиной волны во всяком случае значительно короче 10^{-8} см. Но достаточно одного единственного кванта такого излучения, чтобы полностью вырвать электрон с его «орбиты» (вследствие чего всегда можно определить только одну единственную пространственную точку такой орбиты), и потому слово «орбита» здесь также не имеет разумного смысла. К этому выводу можно прийти, даже не зная новейших теорий, просто рассматривая одни лишь возможности эксперимента.

В противоположность этому мысленное измерение положения большого числа атомов в состоянии $1S$ выполнить можно. (Атомы в принципе возможно изолировать в некотором заданном «стационарном» состоянии, например, с помощью опыта Штерна—Герлаха.) Поэтому для определенного состояния атома, например, $1S$, должна существовать функция вероятности координат электрона, которая соответствует среднему значению классической орбиты, взятому по всем фазам, и которая может быть определена с какой угодно точностью путем измерений. По Борну[3], эта функция дается произведением $\psi_{1S}(q)\overline{\psi}_{1S}(q)$, где $\psi_{1S}(q)$ означает шредингеровскую волновую функцию, принадлежащую состоянию $1S$. Вместе с Дираком и Иорданом я хотел бы, имея в виду позднейшие обобщения, сказать: вероятность дается произведением $S(1S,q)\overline{S}(1S,q)$, где $S(1S,q)$ означает тот столбец матрицы преобразования $S(E,q)$ энергии E по q, который принадлежит $E = E_{1S}$.

В том, что в квантовой теории для определенного состояния, например, $1S$ можно указать только вероятностную функцию координат электрона, можно вместе с Борном и Иорданом усматривать характеристическую статистическую черту квантовой теории в противоположность классической теории. Однако, при желании можно, вместе с Дираком, также сказать, что статистика привносится нашими экспериментами. Ибо, очевидно, что *и в классической теории* можно было указывать только вероятность некоторого определенного положения электрона, если

---

[3] Статистический смысл волн де Бройля впервые был сформулирован А. Эйнштейном (*Einstein A.* Sitzungsber. preuss. Akad. Wiss., 1925, 3. — Русский перевод: *Эйнштейн А.* Собрание научных трудов. Т. 3. М.: Наука, 1966. С. 489). Этот статистический элемент в квантовой механике играет существенную роль в работах М. Борна, В. Гейзенберга и П. Иордана (*Born M., Heisenberg W., Jordan P.* Quantenmechanik II. Zs. Phys., 1926, **35**, 557. — Русский перевод: с. 127–175) особенно в гл. 4, § 3, и П. Иордана (*Jordan P.* Zs. Phys., 1926, **37**, 376); математически он был проанализирован и применен для объяснения процессов столкновения в основоположной работе М. Борна (*Born M.* Zs. Phys., 1926, **38**, 803). Обоснование вероятностной интерпретации на основе теории преобразований матриц имеется в работах: *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1926, **40**, 501; *Jordan P.* Zs. Phys., 1926, **40**, 661; *Pauli W.* Примечание в Zs. Phys., 1927, **41**, 81; *Dirac P.* Proc. Roy. Soc., 1926, **A 113**, 621; *Jordan P.* Zs. Phys., 1926, **40**, 809. В общем виде статистическая сторона квантовой механики обсуждается в работах *Jordan P.* Naturwiss., 1927, **15**, 105; *Born M.* Naturwiss., 1927, **15**, 238.

нам неизвестны фазы атома. Различие между классической и квантовой механикой состоит скорее в том, что классически мы всегда можем считать фазы известными из предшествующих экспериментов. Однако на самом деле это невозможно, потому что всякий эксперимент по определению фазы разрушает или изменяет атом. В определенном стационарном «состоянии» атома фазы являются принципиально неопределенными, в чем можно усматривать непосредственную интерпретацию известных уравнений

$$\mathbf{Et} - \mathbf{tE} = \frac{h}{2\pi i} \quad \text{или} \quad \mathbf{Jw} - \mathbf{wJ} = \frac{h}{2\pi i}$$

(здесь $\mathbf{J}$ — переменная действия, $\mathbf{w}$ — угловая переменная).

Понятие «скорость» некоторого предмета можно легко определить с помощью измерений, если речь идет о свободном движении. Можно, например, осветить предмет красным светом и измерить скорость частицы, определяя эффект Допплера в рассеянном свете. Чем больше длина волны взятого света, тем точнее будет измерена скорость, потому что тогда световой квант будет тем меньше изменять скорость частицы вследствие эффекта Комптона. Определение координат тогда станет соответственно неточным, как показывает уравнение (1). Если надо измерить скорость некоторого электрона в атоме в некоторый определенный момент времени, то мы должны примерно в этот момент заставить внезапно исчезнуть заряд ядра и силы воздействия остальных электронов, так что движение после этого станет свободным, и тогда можно будет выполнить указанное выше измерение. Как и выше, здесь можно легко убедиться в том, что для определенного состояния атома, например $1S$, функция $p(t)$ не может быть определена. Напротив, в этом состоянии опять существует вероятностная функция p, значение которой, по Дираку и Иордану, равно $S(1S,p)\bar{S}(1S,p)$. Здесь $S(1S,p)$ снова означает тот столбец матрицы преобразования $S(E,p)$ энергии $\mathbf{E}$ по $\mathbf{p}$, который принадлежит $E = E_{1S}$.

Наконец, следует указать еще эксперименты, позволяющие измерять энергию или значения переменной действия J; такие эксперименты представляются особенно важными, потому что только с их помощью можно определить, что же мы имеем в виду, говоря о дискретном изменении энергии и J. Вследствие справедливости закона сохранения энергии в квантовой теории опыты Франка—Герца со столкновениями электронов позволяют свести измерение энергии атома к измерению энергии прямолинейно движущегося электрона. Это измерение может быть выполнено в принципе с любой точностью, если только отказаться от одновременного определения положения, т. е. фазы, электрона (ср. выше с определением p) в соответствии с соотношением $\mathbf{Et} - \mathbf{tE} = h/2\pi i$. Опыт Штерна—Герлаха позволяет определять магнитный или средний электрический момент атома, т. е. измерять величины, зависящие только от переменной действия J. Фазы остаются принципиально неопределенными. Так же, как лишено смысла говорить о частоте световой волны в некоторый определенный момент времени, нельзя говорить об энергии атома в некоторый определенный момент времени. В опыте Штерна—Герлаха этому отвечает то обстоятельство, что точность измерения энергии тем меньше, чем короче промежуток времени, в течение которого атом подвергается действию отклоняющей силы[4]. Ведь верхняя граница для отклоняющей силы задается тем, что изменение потенциальной энергии указанной отклоняющей силы в пределах атомного пучка должно быть существенно меньше различия энергии стационарных состояний, если

[4] См. по этому поводу *Pauli W.* Op. cit. S. 61. — Русский перевод: *Паули В.* Указ. соч. С. 80–81.

только определение энергии стационарных состояний возможно. Пусть E_1 будет величина энергии, удовлетворяющая этому условию (E_1 также равна точности измерения энергии); тогда E_1/d будет наибольшим значением отклоняющей силы, если d означает ширину пучка атомов (измеряемую шириной используемой щели). Угловое отклонение атомного пучка тогда будет равно $E_1 t_1/dp$, где t_1 означает промежуток времени, в течение которого атомы подвергаются действию отклоняющей силы, p — импульс атомов в направлении пучка. Для того, чтобы измерение было возможным, это отклонение по величине должно быть по меньшей мере того порядка, как и естественное расширение пучка, вызванное дифракцией на щели. Угловое отклонение из-за дифракции примерно равно λ/d, где λ означает длину волны де Бройля, так что

$$\frac{\lambda}{d} \sim \frac{E_1 t_1}{dp} \quad \text{или, поскольку} \quad \lambda = \frac{h}{p},$$

$$E_1 t_1 \sim h. \tag{2}$$

Это уравнение соответствует уравнению (1). Оно показывает, что точное определение энергии может быть достигнуто только при соответствующей неточности в определении времени.

§ 2
Теория Дирака—Иордана

Результаты предшествующего раздела можно кратко сформулировать и обобщить следующим образом: *все понятия, которые используются для описания механической системы в классической теории, могут быть точно определены также для процессов в атоме, аналогичных классическим явлениям.* Однако эксперименты, с помощью которых можно было бы сделать это, в соответствии с опытом, заключают в себе неопределенность, если мы требуем, чтобы они давали одновременно точные значения канонически сопряженных величин. Степень этой неопределенности дается соотношением (1) (в применении к каким-либо каноническим сопряженным величинам). Здесь напрашивается сравнение квантовой теории со специальной теорией относительности. В соответствии с теорией относительности слово «одновременность» может быть определено не иначе как при помощи экспериментов, в которых существенно используется скорость распространения света. Если бы существовало более «четкое» определение одновременности, к примеру, с помощью сигналов, распространяющихся бесконечно быстро, то теория относительности не была бы возможной. Но так как таких сигналов не бывает, так как, наоборот, скорость света уже входит в определение одновременности, становится возможным постулат о постоянстве скорости света, причем этот постулат не противоречит употреблению слов «положение, скорость, время» в соответствии с их физическим смыслом. Аналогично обстоит дело с определением понятий «положение (координата) электрона, скорость» в квантовой теории. Все эксперименты, которые мы можем применить для определения этих понятий, необходимо содержат соответствующую уравнению (1) неточность, хотя они и позволяют точно определить каждую из величин p, q по отдельности. Если бы существовали эксперименты, которые одновременно позволяли бы определить p и q «более точно», чем это следует из уравнения (1), то квантовая механика была бы невозможной. Таким образом, неточность, установленная уравнением (1), только обеспечивает справедливость

связей, точно выражаемых квантовомеханическими перестановочными соотношениями

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i}.$$

Она делает это уравнение возможным при сохранении физического смысла величин p и q.

Для тех физических явлений, для которых квантовотеоретическая формулировка еще неизвестна (например, для электродинамики), уравнение (1) означает требование, которое может быть полезным при отыскании новых законов. В квантовой механике уравнение (1) может быть выведено из формулировки Дирака—Иордана с помощью ее небольшого обобщения. Если для определенного значения η какого-нибудь параметра, мы, определяя координату электрона q, находим ее равной q' с неточностью q_1, то этот факт можно описать, задавая амплитуду вероятности $S(\eta, q)$, которая заметно отличается от нуля только вблизи q' в области, размер которой приблизительно равен q_1. В частности, можно положить

$$S(\eta, q) \sim \exp\left\{-\frac{(q-q')^2}{2q_1^2} - \frac{2\pi i}{h}p'(q-q')\right\},$$

так что

$$S\bar{S} \sim e^{-(q-q')^2/q_1^2}. \tag{3}$$

Тогда для амплитуды вероятности, соответствующей p, имеем

$$S(\eta, p) = \int S(\eta, q)\, S(q, p)\, dq. \tag{4}$$

По Иордану, $S(q, p)$ можно взять в виде

$$S(q, p) = e^{2\pi i pq/h}. \tag{5}$$

По формуле (4) $S(\eta, p)$ теперь будет заметно отличаться от нуля только для таких значений p, для которых $\frac{2\pi(p-p')q_1}{h}$ не слишком превышает 1. В частности для случая (3) имеем

$$S(\eta.p) \sim \int \exp\left\{\frac{2\pi i(p-p')q}{h} - \frac{(q'-q)^2}{2q_1^2}\right\} dq,$$

т. е.

$$S(\eta, p) \sim \exp\left\{-\frac{(p-p')^2}{2p_1^2} + \frac{2\pi i}{h}q'(p-p')\right\},$$

так что

$$S\bar{S} \sim e^{-(p-p')^2/p_1^2},$$

где

$$p_1 q_1 = \frac{h}{2\pi}. \tag{6}$$

Таким образом, предположение (3) для $S(\eta, q)$ соответствует экспериментальному факту, что для p и q были измерены значения p' и q' (с ограничением точности (6)).

В чисто математическом отношении формулировка квантовой механики, данная Дираком и Иорданом, отличается тем, что соотношения между $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$, $\mathbf{E}$ и т. д.

могут быть записаны в виде уравнений для матриц весьма общего вида, таких, что каждая заранее заданная квантовотеоретическая величина принимает форму диагональной матрицы. Возможность такой записи становится очевидной, если представить себе наглядно матрицы как тензоры (например, моментов инерции) в многомерных пространствах, связанные между собой математическими соотношениями. Оси системы координат, в которой выражаются эти математические соотношения, всегда можно расположить по главным осям одного из этих тензоров. Наконец, математическое соотношение между двумя тензорами A и B можно также всегда характеризовать формулами преобразования, переводящего систему координат, ориентированную по главным осям A, в другую систему, ориентированную по главным осям B. Последняя формулировка соответствует теории Шредингера. Истинно же «инвариантной», не зависящей ни от каких координатных систем, интерпретацией квантовой механики мы будем считать формальную схему Дирака, в которой введено понятие q-чисел. Если мы хотим получать из этой математической схемы физические результаты, то мы должны квантовотеоретическим величинам, таким, как матрицы (или «тензоры» в многомерном пространстве), сопоставлять числа. Это следует понимать в том смысле, что в указанном многомерном пространстве произвольно выделяется некоторое определенное направление (именно, оно устанавливается родом поставленного эксперимента) и спрашивается, какое «значение» (например, значение момента инерции в наглядной иллюстрации) матрица имеет в этом выделенном направлении. Этот вопрос имеет однозначный смысл только тогда, когда веделенное направление совпадает с направлением одной из главных осей рассматриваемой матрицы; в этом случае на поставленный вопрос существует точный ответ. Но и в том случае, когда выделенное направление несколько отклоняется от одной из главных осей матрицы, все же можно говорить о «значении» матрицы в заданном направлении с некоторой неточностью, заданной относительным отклонением, т. е. с некоторой вероятной ошибкой. Таким образом, мы можем сказать: каждой квантовотеоретической величине или матрице можно сопоставить некое число, указывающее ее «значение с некоторой вероятной ошибкой; вероятная ошибка зависит от системы координат; для каждой квантовотеоретической величины существует одна система координат, в которой вероятная ошибка для этой величины исчезает. Следовательно, некоторый определенный эксперимент никогда не может давать точных сведений о всех квантовотеоретических величинах, скорее он подразделяет характерным для себя образом физические величины на «известные» и «неизвестные» (или: величины, известные с большей или меньшей точностью). Результаты двух экспериментов можно точно вывести один из другого только тогда, когда оба эксперимента подразделяют физические величины на «известные» и «неизвестные» одинаковым образом (т. е. когда тензоры в многомерном пространстве, которое много раз применялось для наглядности описания, были «видны» в обоих экспериментах с одного и того направления). Если же два эксперимента дают различное разбиение величин на «известное» и «неизвестное», то результаты этих экспериментов могут быть связаны между собой только случайно, статистически.

С целью более детального рассмотрения указанной выше статистической взаимосвязи мы обсудим мысленный эксперимент. Предположим, что пучок атомов в опыте Штерна—Герлаха сначала пересекает поле F_1, обладающее в направлении пучка настолько сильной неоднородностью, что оно вызывает заметное число переходов вследствие вызываемого им «встряхивания». Затем пусть пучок атомов летит некоторое время свободно, но на некотором определенном расстоянии от F_1 пусть начинается второе поле F_2, столь же неоднородное, как F_1.

В промежутке между F_1 и F_2, а также после F_2, мы можем измерить числа атомов в различных стационарных состояниях, прикладывая, например, магнитное поле. Силы реакции излучения атомов мы приравняем нулю. Если мы знаем, что атом, прежде чем пересечь поле F_1, находился в состоянии с энергией E_n, то этот экспериментальный факт мы можем описать, поставив атому в соответствие волновую функцию — например, в p-пространстве — с определенной энергией E_n и *неопределенной* фазой β_n

$$S(E_n, p) = \psi(E_n, p) \exp\left\{-2\pi i E_n \frac{\alpha + \beta_n}{h}\right\}.$$

После пересечения поля F_1 эта функция превратится[5)] в следующую:

$$S(E_n, p) \xrightarrow{F_1} \sum_m c_{nm} \psi(E_m, p) \exp\left\{-2\pi i E_m \frac{\alpha + \beta_m}{h}\right\}. \tag{7}$$

Здесь β_m выбираются произвольно таким образом, чтобы коэффициенты c_{nm} определялись полем F_1 однозначно. Матрица c_{nm} преобразует значения энергии, существовавшие до пересечения поля F_1, к значениям энергии после пересечения поля F_1. Если мы произведем определение стационарных состояний после F_1, например, с помощью неоднородного магнитного поля, то с вероятностью $c_{nm}\bar{c}_{nm}$ мы найдем, что атом перешел из состояния n в состояние m. Если мы установим экспериментально, что атом в самом деле перешел именно в состояние m, то для последующих вычислений мы должны будем сопоставить ему не функцию $\sum_m c_{nm} S_m$, а функцию S_m с неопределенной фазой; экспериментально установив «состояние m», мы выбираем из множества возможностей (c_{nm}) лишь одну определенную (m), но в то же время, как будет показано впоследствии, разрушаем все сведения о фазовых соотношениях, содержавшиеся еще в величинах c_{nm}. При пересечении пучком атомов поля F_2 повторяется то же самое, что было при прохождении через поле F_1. Пусть d_{nm} будут коэффициенты матрицы преобразования, которые переводят энергии до поля F_2 в энергии после поля F_2. Если между полями F_1 и F_2 измерение состояния не производится, то собственная функция преобразуется по следующей схеме

$$S(E_n, p) \xrightarrow{F_1} \sum_m c_{nm} S(E_m, p) \xrightarrow{F_2} \sum_m \sum_l c_{nm} d_{ml} S(E_l, p). \tag{8}$$

Введем обозначение $\sum_m c_{nm} d_{ml} = e_{nl}$. Если стационарное состояние атома установлено после пересечения поля F_2, то с вероятностью $e_{nl}\bar{e}_{nl}$ мы найдем состояние l. Если же в промежутке между F_1 и F_2 было экспериментально установлено «состояние m», то вероятность состояния «l» после F_2 будет задана произведением $d_{ml}\bar{d}_{ml}$. Таким образом, при многократном повторении всего эксперимента (причем *каждый раз* между F_1 и F_2 производится определение состояния) после F_2 будет наблюдено состояние l с относительной частотой $Z_{nl} = \sum_m c_{nm}\bar{c}_{nm} d_{ml}\bar{d}_{ml}$. Это выражение не совпадает с $e_{nl}\bar{e}_{nl}$. Иордан говорил поэтому об «интерференции вероятностей». Однако я не хотел бы присоединяться к этому мнению. Ведь эти два эксперимента, дающие $e_{nl}\bar{e}_{nl}$ или Z_{nl}, на самом деле физически различаются. В одном случае атом между F_1 и F_2 не испытывает возмущения, в другом он подвергается действию

[5)] *Dirac P.* Proc. Roy. Soc., 1926, **A 112**, 661; *Born M.* Zs. Phys., 1926, **40**, 167.

приборов, которые позволяют произвести определение стационарного состояния. Вследствие применения этих приборов «фаза» атома изменяется принципиально неконтролируемым образом, точно так же, как при определении координат электрона изменяется его импульс (см. § 1). Магнитное поле для определения состояния между F_1 и F_2 будет расстраивать собственные значения E, при наблюдении пучка атомов (я имею здесь в виду, например, снимки Вильсона) атомы будут тормозиться различным, статистически неконтролируемым образом и т. д. Вследствие этого окончательная матрица преобразования (от значений энергии до прохождения через поле F_1 к значениям энергии после выхода из поля F_2) e_{nl} уже не будет равна $\sum\limits_m c_{nm}d_{ml}$, так как каждый член суммы имеет еще неизвестный фазовый сомножитель. Таким образом, мы можем лишь ожидать, что усредненное по всем этим фазовым изменениям значение $e_{nl}\bar{e}_{nl}$ равно Z_{nl}. Простое вычисление показывает, что это действительно так и есть. Итак, на основании одного эксперимента мы можем по некоторым статистическим правилам делать предсказания о возможных результатах другого эксперимента. Этот второй эксперимент сам выбирает из полного множества возможных исходов один вполне определенный и тем самым ограничивает возможные исходы всех последующих экспериментов. Такая интерпретация уравнения, определяющего матрицу преобразования S, или волнового уравнения Шредингера возможна только потому, что сумма решений снова есть решение. В этом мы видим глубокий смысл линейности уравнений Шредингера; именно поэтому эти уравнения можно понимать только как уравнения волн в фазовом пространстве, и поэтому же мы можем считать безнадежной всякую попытку сделать эти уравнения нелинейными, например, в релятивистском случае (для многих электронов).

§ 3
Переход от микро- к макромеханике

Анализ терминов «положение (координата) электрона», «скорость», «энергия» и т. д., проведенный в предшествующих параграфах, прояснил, по-моему, в достаточной мере понятия квантовотеоретической кинематики и механики, так что теперь должна также существовать возможность наглядного объяснения макроскопических явлений с позиций квантовой механики. Переход от микро- к макромеханике рассматривался еще Шредингером[6], но я не думаю, что рассуждение Шредингера относится к существу проблемы, и притом по следующим причинам. По Шредингеру, в высоко возбужденных состояниях сумма собственных колебаний должна образовывать не слишком большой волновой пакет, который в свою очередь при периодических изменениях своей величины совершает такие же периодические движения, как и классический «электрон». На это можно возразить следующим образом: если бы волновой пакет имел такие свойства, какие были описаны выше, то испускаемое атомом излучение можно было бы разлагать в ряд Фурье, в котором частоты обертонов были бы целыми кратными некоторой основной частоте. Однако, согласно квантовой механике частоты спектральных линий, испускаемых атомом, никогда не бывают целыми кратными некоторой основной частоте — исключая особый случай гармонического осциллятора. Рассуждение Шредингера, следовательно, можно провести только для рассмотренного им гармонического осциллятора, во *всех же других* случаях волновой пакет с течением времени расплывается по всему пространству в окрестности атома. Чем выше возбужденное состояние атома, тем медленнее происходит указанное расплывание волнового

[6] *Schrödinger E.* Naturwiss., 1926, **14**, 664.

пакета. Но если подождать достаточно долго, то оно произойдет. Приведенный выше аргумент, касающийся испускаемого атомом излучения, может быть выдвинут, прежде всего, против всех попыток добиться непосредственного перехода квантовой механики в классическую при больших квантовых числах. Поэтому раньше этот аргумент пытались обойти, ссылаясь на естественную ширину излучения из стационарных состояний; без сомнения: незаконно, ибо, во-первых, этот выход оказывается закрытым уже для атома водорода ввиду малой интенсивности излучения в высоко возбужденных состояниях, и, во-вторых, переход квантовой механики в классическую должен быть понятен даже без заимствований из электродинамики. На эти известные трудности, стоящие на пути непосредственного перехода квантовой теории в классическую, раньше уже не раз указывал Бор[7]. Мы разъяснили их здесь снова столь обстоятельно лишь потому, что в последнее время их, по-видимому, стали предавать забвению.

Я думаю, что возникновение классической «траектории» («орбиты») можно сформулировать точно следующим образом: *«траектория» («орбита») возникает только вследствие того, что мы ее наблюдаем.* Пусть, например, имеется атом в 1 000-м возбужденном состоянии. Размеры орбиты здесь уже относительно велики, так что в духе § 1 достаточно провести определение положения электрона с помощью сравнительно длинноволнового света. Если мы хотим определить положение с не очень большой ошибкой, то вследствие комптоновской отдачи атом будет находиться после столкновения в состоянии, имеющем номер, скажем, где-нибудь между 950 и 1 050; одновременно по эффекту Допплера можно измерить импульс электрона с точностью, определяемой соотношением (1), Этот экспериментальный факт можно характеризовать волновым пакетом в q-пространстве — лучше сказать, вероятностным пакетом, — составленным в основном из собственных функций в диапазоне состояний от 950 до 1 050, причем размеры пакета определяются длиной волны использованного света, а также соответствующим волновым пакетом в p-пространстве. Пусть по прошествии некоторого времени мы произведем измерение положения с такой же точностью. Его результаты в соответствии с § 2 можно указать только статистически, поскольку следует учитывать все вероятные положения внутри теперь уже расплывшегося волнового пакета причем вероятности эти могут быть вычислены. Ничуть не иначе дело обстояло бы в классической теории, так как и там вследствие неточности первого измерения результат второго измерения координаты можно было бы предсказать только статистически; системы траекторий (орбит) классической теории тоже расплывались бы подобно волновому пакету. Конечно, сами статистические законы в квантовой механике и в классической теории различаются. Второе измерение координаты выбирает из множества возможностей одно определенное значение «q» и ограничивает возможности всех последующих измерений. После второго определения координаты результаты всех дальнейших измерений можно вычислить, только сопоставляя электрону снова «меньший» волновой пакет величиной λ (равной длине волны, используемого для наблюдения). Таким образом, каждое определение координаты уменьшает волновой пакет снова до первоначальной величины λ. «Значения» переменных $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ во время всех опытов известны лишь с некоторой определенной точностью. Тот факт, что значения $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ *в пределах этой точности* удовлетворяют классическим уравнениям движения, можно доказать непосредственно с помощью квантовомеханических законов.

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\mathbf{p}}. \tag{9}$$

[7] *Бор Н.* Основные постулаты квантовой теории (Zs. Phys., 1923, **13**, 117).

Однако, как уже сказано, вычисление траектории по начальным условиям возможно производить только статистически, и это можно рассматривать как следствие принципиальной неточности начальных условий. Статистические законы различны для квантовой механики и классической теории; при некоторых условиях это может приводить к грубым макроскопическим различиям классической теории от квантовой. Прежде чем перейти к обсуждению соответствующего примера, я хотел бы показать, как следует формулировать математически упомянутый выше переход к классической теории для самой простой задачи механики, а именно для свободного движения материальной точки. Уравнения движения гласят (в одномерном случае):

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2, \quad \dot{q} = \frac{1}{m}\mathbf{p}, \quad \dot{\mathbf{p}} = 0. \tag{10}$$

Поскольку время в отсутствие зависящих от него внешних сил можно рассматривать как параметр («c-число»), то решение этих уравнений имеет вид

$$\mathbf{q} = \frac{1}{m}\mathbf{p}_0 t + \mathbf{q}_0, \quad \mathbf{p} = \mathbf{p}_0. \tag{11}$$

Здесь $\mathbf{p}_0$ и $\mathbf{q}_0$ означают импульс и координату для времени $t = 0$. Пусть в момент времени $t = 0$ см. уравнения (3)–(6) измерено значение $q_0 = q'$ с неточностью q_1, а значение $p_0 = p'$ с неточностью p_1. Чтобы по «значениям» $\mathbf{p}_0$ и $\mathbf{q}_0$ делать выводы о «значениях» $\mathbf{q}$ в момент времени t, согласно Дираку и Иордану необходимо найти такие функции преобразования, которые переводят все матрицы, содержащие $\mathbf{q}_0$ в диагональной форме, в матрицы, содержащие в диагональном виде $\mathbf{q}$. В матричной схеме, в которой матрица $\mathbf{q}_0$ является диагональной, $\mathbf{p}_0$ можно заменить оператором $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_0}$. По Дираку, искомая амплитуда преобразования $S(q_0, q)$ удовлетворяет тогда дифференциальному уравнению

$$\left\{\frac{t}{m}\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial q_0} + q_0\right\} S(q_0, q) = qS(q_0, q), \tag{12}$$

$$\frac{t}{m}\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial S}{\partial q_0} = (q_0 - q)S(q_0, q),$$

$$S(q_0, q) = \text{const} \cdot \exp\left\{\frac{2\pi\, im \int (q - q_0)\, dq_0}{ht}\right\}. \tag{13}$$

Таким образом, если произведение $S\bar{S}$ не зависит от q_0, т. е. если для времени t оно известно точно, то для какого-нибудь времени $t > 0$ все значения q становятся равновероятными, т. е. вероятность того, что q находится в некоторой конечной области, вообще оказывается равной нулю. Правда, это совершенно очевидно. Ведь точное определение q_0 приведет к бесконечно большой комптоновской отдаче. Естественно, это же самое будет верно для всякой механической системы. Если же значение q_0 для времени $t = 0$ было известно с точностью q_1, а p_0 — с точностью p_1 (см. уравнение (3))

$$S(\eta, q) = \text{const} \cdot \exp\left\{-\frac{(q_0 - q')^2}{2q_1^2} - \frac{2\pi i}{h}p'(q_0 - q')\right\},$$

то функция вероятности для q должна определяться по формуле

$$S(\eta, q) = \int S(\eta, q_0)\, S(q_0, q)\, dq_0.$$

В результате получается

$$S(\eta, q) = \text{const} \int \exp\left\{\frac{2\pi i m}{th}\left[q_0\left(q - \frac{t}{m}p'\right) - \frac{q_0^2}{2}\right] - \frac{(q' - q_0)^2}{2q_1^2}\right\} dq_0. \quad (14)$$

Вводя сокращенное обозначение

$$\beta = \frac{th}{2\pi m q_1^2}, \quad (15)$$

мы приведем показатель в формуле (14) к виду

$$-\frac{1}{2q_1^2}\left\{q_0^2\left(1 + \frac{i}{\beta}\right) - 2q_0\left[q' + \frac{i}{\beta}\left(q - \frac{t}{m}p'\right)\right] + q'^2\right\}.$$

Слагаемое, содержащее q'^2, можно включить в постоянный (не зависящий от q) множитель, после чего интегрирование дает

$$S(\eta, q) = \text{const} \cdot \exp\left\{\frac{1}{2q_1^2}\frac{\left[q' + \frac{i}{\beta}\left(q - \frac{t}{m}p'\right)\right]^2}{1 + \frac{i}{\beta}}\right\} =$$

$$= \text{const} \cdot \exp\left\{-\frac{\left(q - \frac{t}{m}p' - i\beta q'\right)^2\left(1 - \frac{i}{\beta}\right)}{2q_1^2(1 + \beta^2)}\right\}. \quad (16)$$

Отсюда следует

$$S(\eta, q)\overline{S(\eta, q)} = \text{const} \cdot \exp\left\{-\frac{\left(q - \frac{t}{m}p' - q'\right)^2}{q_1^2(1 + \beta^2)}\right\}. \quad (17)$$

Итак, в момент времени t электрон находится вблизи точки с координатой $\frac{t}{m}p' + q'$ с точностью $q_1\sqrt{1+\beta^2}$. «Волновой пакет», или лучше сказать «вероятностный пакет», увеличился в $\sqrt{1+\beta^2}$ раз. По формуле (15) значение β пропорционально времени t, обратно пропорционально массе — это очевидно непосредственно — и обратно пропорционально q_1^2. Слишком большая точность для q_0 влечет за собой большую неточность для p_0 и потому ведет также к большой неточности в величине q. Параметр η, введенный нами выше по формальным причинам, теперь можно было бы опустить во всех формулах, так как в наши вычисления он не входит.

Как пример того, что отличие классических статистических законов от квантовотеоретических при некоторых обстоятельствах приводит к грубым макроскопическим различиям между результатами обеих теорий, мы рассмотрим кратко отражение потока электронов от решетки. Если постоянная решетки имеет размер порядка длины волны де Бройля для электрона, то отражение происходит по определенным дискретным направлениям в пространстве, подобно отражению света от решетки. Грубо макроскопически классическая теория дает здесь нечто совершенно иное. Несмотря на это, мы устанавливаем траектории отдельного электрона без противоречий с классической теорией. Мы могли бы сделать это, например, если бы отклонили электрон на определенное место на штрихе решетки и потом определили, что отражение там неклассическое. Но если мы хотим определить положение

электрона с такой точностью, чтобы можно было сказать, на какое место штриха решетки он попадает, то при этом измерении координаты скорость электрона станет настолько больше, а его волна де Бройля настолько меньше, что отражение теперь в этом приближении на самом деле может и будет происходить в направлении, предписываемом классической теорией, без противоречий с законами квантовой теории.

§4
Обсуждение некоторых мысленных экспериментов

В соответствии с предлагаемой здесь наглядной интерпретацией квантовой теории моменты времени переходов, «квантовых скачков», должны определяться посредством измерений с такой же точностью с какой измеряются, например, энергии в стационарных состояниях. Точность, с которой может быть определен такой момент времени, в соответствии с уравнением (2) дается отношением $h/\Delta E$[8], где ΔE означает изменение энергии при квантовом скачке. Представим себе мысленно, например, следующий эксперимент. Пусть некоторый атом, находившийся в момент времени $t = 0$ в состоянии 2, переходит в нормальное состояние (1), испуская свет. Тогда атому можно сопоставить по аналогии с уравнением (7) собственную функцию

$$S(t,p) = e^{-\alpha t}\psi(E_2,p)\,e^{-2\pi i E_2 t/h} + \sqrt{1-e^{-2\alpha t}}\psi(E_1,p)\,e^{-2\pi i E_1 t/h}, \qquad (18)$$

если мы предположим, что затухание излучения входит в собственную функцию в виде множителя $e^{-\alpha t}$ (истинная зависимость может быть не такой простой). Пусть мы измеряем энергию этого атома, направляя его в неоднородное магнитное поле, как это обычно делается в опыте Штерна—Герлаха, причем неоднородное поле должно действовать на пучок атомов на значительной части траектории пучка. Ускорение атома измеряется, например, таким образом, что весь путь, который проходит пучок атомов в магнитном поле, разбивают на малые отрезки, в конце которых определяют отклонение пучка. В соответствии со скоростью атомного пучка разбиение пути на отрезки означает для атома разбиение на малые интервалы времени Δt.

Как показывает уравнение (2) §1, интервалу Δt соответствует в значении энергии точность $h/\Delta t$. Вероятность измерить определенную энергию E может быть получена непосредственно из функции $S(p,E)$ и потому в интервале от $n\Delta t$ до $(n+1)\Delta t$ она вычисляется по формуле

$$\underset{n\Delta t\to(n+1)\Delta t}{S(p,E)} = \int\limits_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} S(p,t)\,e^{2\pi i E/h}\,dt.$$

Если в момент времени $(n+1)\Delta t$ произведено измерение с результатом «состояние 2», то после этого времени атому следует сопоставлять уже не собственную функцию (18), а такую функцию, которая получается из (18) путем замены t на $t-(n+1)\Delta t$. Если же при измерении получен результат «состояние 1», то, начиная с этого момента времени, атому следует сопоставлять собственную функцию

$$\psi(E_1,p)\,e^{-2\pi i E_1 t/h}.$$

[8] *Pauli W.* Op. cit. S. 12.

Таким образом, сначала в ряде интервалов Δt будет наблюдаться «состояние 2», потом все время «состояние 1». Для того, чтобы оба эти состояния можно было различать между собой, интервал Δt не должен становиться меньше $h/\Delta E$. Следовательно, момент времени перехода может быть определен с этой точностью. Говоря о дискретном изменении энергии, мы интерпретируем эксперимент только что описанного рода вполне в духе старой, основанной Планком, Эйнштейном и Бором квантовой теории. Поскольку такой эксперимент в принципе может быть произведен, его исход также должен согласовываться с этой старой теорией.

В основных постулатах квантовой теории Бора энергия атома, так же как и каждая из переменных действия, выделена по отношению к другим определяемым величинам (координате электрона и т. д.) тем, что ее численное значение может быть указано всегда. Однако, это веделенное по отношению к другим квантовомеханическим величинам положение энергия занимает только потому, что в замкнутых системах она образует интеграл уравнений движения (для матрицы энергии имеем $E = \text{const}$); напротив, в незамкнутых системах энергия от других квантовомеханичееких величин не отличается. В частности, можно сделать эксперименты, в которых фазы атома w будут измерены точно, однако тогда энергия останется принципиально неопределенной в соответствии с соотношением $\mathbf{Jw} - \mathbf{wJ}$ или $J_1 w_1 \sim h$. Такой эксперимент реализуется, например, при резонансной флюоресценции. Если мы облучаем атом светом, частота которого равна собственной частоте атома, скажем $\nu_{12} = (E_2 - E_1)/h$, то атом колеблется в фазе с внешним излучением, причем принципиально не имеет смысла спрашивать, в каком состоянии —E_1 или E_2 — атом совершает такие колебания. Фазовое соотношение между атомом и внешним излучением можно установить, например, с помощью фазовых соотношений для большого числа атомов (опыты Вуда). Если же мы предпочитаем отказаться от опытов с излучением, то фазовое соотношение можно измерить также, выполняя (в смысле § 1) точное определение координат электрона в различные моменты времени по отношению к фазе облучающего света (для большого числа атомов). Отдельному атому тогда можно сопоставить «волновую функцию»

$$S(q,t) = c_2\psi_2(E_2,q)\, e^{-2\pi i(E_2+\beta)/h} + \sqrt{1-c_2^2}\,\psi_1(E_1,q)\, e^{-2\pi i E_1 t/h}. \qquad (19)$$

Здесь c_2 зависит от интенсивности, а β — от фазы облучающего света. Таким образом, вероятность некоторого определенного значения координаты q дается формулой

$$S(q,t)\,\overline{S(q,t)} = c_2^2\psi_2\bar{\psi}_2 + \left(1-c_2^2\right)\psi_1\bar{\psi}_1 + \\ + c_2\sqrt{1-c_2^2}\left(\psi_2\bar{\psi}_1 e^{-2\pi i[(E_2-E_1)t+\beta]/h} + \bar{\psi}_2\psi_1 e^{+2\pi i[(E_2-E_1)t+\beta]/h}\right). \qquad (20)$$

Периодический член в формуле (20) может быть экспериментально отделен от непериодического, поскольку измерения координат можно выполнить при различных фазах облучающего света.

В известном мысленном эксперименте, указанном Бором, атомы в пучке Штерна—Герлаха сначала возбуждаются в некотором определенном месте облучающим светом до резонансной флюоресценции. Затем они проходят некоторую часть пути в неоднородном магнитном поле; испускаемое атомами излучение может быть наблюдено во время всего пути, до и после магнитного поля. До того, как атомы вступят в магнитное поле, существует обычная резонансная флюоресценция, т. е. по аналогии с теорией дисперсии следует предполагать, что атомы испускают сферические волны в фазе с падающим светом. Это последнее представление находится

в противоречии, прежде всего, с тем, что дает простое применение теории световых квантов или основных правил квантовой теории: ведь из них мы бы сделали вывод, будто только некоторые атомы переходят в «верхнее состояние» при поглощении кванта света, и потому все резонансное излучение исходит из небольшого числа возбужденных центров, интенсивно испускающих свет. Поэтому раньше считали естественным говорить: представление о световых квантах может применяться здесь только для баланса энергии и импульса, «в действительности» все атомы в низшем состоянии излучают слабо и когерентно сферические волны. Однако после того, как атомы покинут магнитное поле, едва ли можно сомневаться в том, что атомный пучок разделился на два пучка, из которых один соответствует атомам в верхнем, второй — атомам в низшем состоянии. Если теперь излучали бы атомы в низшем состоянии, то это было бы грубым нарушением закона сохранения энергии, ибо вся энергия возбуждения скрывается в атомах пучка, находящихся в верхнем состоянии. Напротив, не может быть сомнения в том, что после магнитного поля только один атомный пучок с верхними состояниями излучает свет — и притом некогерентный свет — который испускают немногие интенсивные излучающие атомы в верхнем состоянии. Как показал Бор, этот мысленный эксперимент особенно разъясняет, какая осторожность требуется иногда при применении понятия «стационарное состояние». С позиций развитой здесь интерпретации квантовой теории обсуждение эксперимента Бора можно провести без затруднений. В поле внешнего излучения фазы атомов являются определенными, а потому не имеет смысла говорить об энергии атома. Также и после того, как атом покинул поле излучения, нельзя сказать, что он находился в некотором определенном стационарном состоянии, поскольку мы спрашиваем о когерентных свойствах излучения. Однако, можно поставить эксперимент с целью проверить, в каком состоянии находится атом; результат этого эксперимента можно предсказать только статистически. Такой эксперимент действительно выполняется в неоднородном магнитном поле. После магнитного поля энергии атомов будут определенными, но фазы неопределенными. Свет излучается здесь некогерентно и только атомами в верхнем состоянии. Магнитное поле определяет энергии и потому разрушает связь между фазами. Мысленный эксперимент Бора дает очень красивое разъяснение того факта, что и энергия атома «в действительности» выражается не числом, а матрицей. Закон сохранения выполняется для матрицы энергии и вследствие этого также для значения энергии с такой точностью, с какой оно по мере надобности измеряется. Формально разрушение фазовых соотношений можно описать примерно так. Если Q означает координаты центра тяжести атома, то мы сопоставим атому вместо (19) собственную функцию

$$S(Q,t)\,S(q,t) = S(Q,q,t). \tag{21}$$

Здесь $S(Q,t)$ — функция, которая [как $S(\eta,q)$ в формуле (16)] отличается от нуля только в малой окрестности точки в Q-пространстве и распространяется в направлении пучка со скоростью атома. Вероятность относительной амплитуды q для каких-либо значений Q дается интегралом по Q от произведения

$$S(Q,q,t)\,s(Q,q,t),$$

т.е. формулой (20). Но собственная функция (21) в магнитном поле изменится и вследствие различного отклонения атомов в верхнем и низшем состояниях после прохождения магнитного поля превратится в следующую

$$S(Q,q,t) = c_2 S_2(Q,t)\,\psi_2(E_2,q)\,e^{2\pi i(E_2 t+\beta)/h} + \sqrt{1-c_2^2}\,S_1(Q,t)\,\psi_1(E_1,q)\,e^{2\pi i E_n t/h}. \tag{22}$$

Функции $S_1(Q,t)$ и $S_2(Q,t)$ в Q-пространстве отличны от нуля только в малой окрестности некоторой точки; однако точка эта для S_1 другая, чем для S_2. Поэтому

произведение S_1S_2 всюду равно нулю. Вероятность относительной амплитуды q и определенного значения Q, таким образом, равна

$$S(Q,q,t)\,\bar{S}(Q,q,t) = c_2^2 S_2\bar{S}_1\psi_2\bar{\psi}_2 + \left(1-c_2^2\right) S_1\bar{S}_1\psi_1\bar{\psi}_1. \qquad (23)$$

Периодическая часть из вероятности (20) здесь исчезла, а тем самым исчезла возможность измерить соотношение между фазами. Результат статистического определения координат всегда будет тот же самый, независимо от того, при какой фазе падающего света оно производится. Мы можем предполагать, что эксперименты с излучением, теории которых еще не существует, дадут такие же результаты о соотношении между фазами атомов и падающего света.

В заключение рассмотрим еще связь уравнения (2) $E_1t_1 \sim h$ с комплексом проблем, которые обсуждались Эренфестом и другими исследователями[9] в двух важных статьях по поводу принципа соответствия Бора[10]. Эренфест и Толмен говорят о «слабом квантовании», когда квантованное периодическое движение прерывается квантовыми скачками или другими возмущениями в интервалы времени, которые можно считать не слишком длинными по сравнению с периодом системы. В этом случае должны встречаться не только точные квантовые значения энергии, но и с небольшой качественно определяемой априорной вероятностью также значения энергии, не слишком отклоняющиеся от квантовых. В квантовой механике это обстоятельство объясняется следующим образом. Так как энергия действительно изменяется внешними возмущениями или квантовыми скачками, то каждое измерение энергии, поскольку оно должно быть однозначным, следует производить во время промежутка между двумя возмущениями. Этим задается верхняя граница для t_1 в смысле § 1. Следовательно, значение энергии E_0 некоторого квантованного состояния мы также измерям лишь с точностью $E_1 \sim h/t_1$. При этом вопрос о том, «действительно» ли система имела с соответственно меньшим статистическим весом такие значения энергии E, которые отклоняются от E_0, или же их экспериментальное обнаружение связано лишь с неточностью измерения, принципиально лишен смысла. Если t_1 меньше периода системы, то уже не имеет смысла говорить о дискретных стационарных состояниях или о дискретных значениях энергии.

Эренфест и Брейт[11] в аналогичной связи обратили внимание на следующий парадокс. Предположим, что ротатор, который мы будем представлять себе как зубчатое колесо, снабжен устройством, изменяющим направление вращения после f оборотов на противоположное. Например, пусть зубчатое колесо находится в зацеплении с зубчатой рейкой, которая в свою очередь может передвигаться прямолинейно между двумя упорами; после некоторого определенного числа оборотов упоры заставляют рейку, а с него и колесо двигаться в обратном направлении. Истинный период системы T велик по сравнению с периодом вращения колеса t; дискретные уровни энергии располагаются соответственно густо и притом тем гуще, чем больше T. Так как с позиций последовательной квантовой теории все стационарные состояния имеют одинаковый статистический вес, то при достаточно большом T будут встречаться практически все значения энергии с одинаковой частотой — в противоположность тому, что следовало ожидать для ротатора. При рассмотрении с наших позиций этот парадокс сначала даже обостряется. Именно, для того чтобы установить, будет ли система принимать особенно часто или одни только принадлежащие ротатору дискретные значения

---

[9] *Ehrenfest P., Breit G.* Zs. Phys., 1922, **9**, 207; *Ehrenfest P., Tolman R.C.* Phys. Rev., 1924, **24**, 287. См. также дискуссию *Бор Н.* Основные постулаты квантовой теории.

[10] На эту связь мне указал В. Паули.

[11] *Ehrenfest P., Breit G.* Zs. Phys., 1922, **9**, 207.

16 Зак. 6

энергии, или же она принимает с равной вероятностью все возможные значения (т. е. значения, соответствующие малым порциям энергии h/T), достаточно проводить измерения за время t_1, малое по сравнению с T (но много большее t); т. е. хотя при таких измерениях большой период совсем не вступает в действие, он проявляется внешне в том, что могут встречаться все возможные значения энергии. Мы придерживаемся того мнения, что такие эксперименты при определении полной энергии системы *на самом деле и дали бы все* возможные значения энергии с равной вероятностью; ответственность за этот результат несет не большой период T, а линейно перемещаемая рейка. Если даже система когда-нибудь находилась в состоянии, энергия которого соответствует квантованию ротатора, то внешними силами, прилагаемыми к рейке, она может быть легко переведена в такие состояния, которые не соответствуют квантованию ротатора[12]. Связанная система — ротатор и рейка — обладают совсем другими свойствами периодичности, чем ротатор. Решение парадокса скорее всего заключается в следующем. Если мы хотим изменить энергию одного ротатора, мы должны сперва отключить связь межлу ротатором и рейкой. В классической теории при достаточно малой массе рейки отключение связи можно выполнить без изменения энергии, поэтому там энергия всей системы может быть приравнена энергии ротатора (при малой массе рейки). В квантовой механике величина энергии взаимодействия между рейкой и колесом должна быть по меньшей мере того же порядка, как разность соседних уровней энергии ротатора (даже при малой массе рейки для упругого взаимодействия между колесом и рейкой существует высокая энергия нулевых колебаний!); при отключении связи у рейки и колеса устанавливаются по отдельности их квантовые значения энергии. Таким образом, пока мы будем измерять значения энергии *одного* ротатора, мы всегда будем находить квантовые значения энергии с заданной экспериментом точностью. Но и при исчезающей массе рейки энергия *связанной* системы будет отлична от энергии ротатора; энергия связанной системы может принимать *все* возможные (допускаемые квантованием T) значения с равной вероятностью.

Квантовотеоретическая кинематика и механика глубоко отличаются от обычной. Однако применимость классических понятий кинематики и механики не может быть обоснована ни нашим мышлением, ни опытом; право на такое заключение дает нам соотношение (1) $p_1 q_1 \sim h$. Поскольку импульс, координата, энергия и т. д. электрона относятся к точно определяемым понятиям, мы можем не беспокоиться о том, что фундаментальное соотношение (1) содержит лишь качественные высказывания. Далее, поскольку мы можем представлять себе во всех простых случаях качественно экспериментальные следствия теории, мы уже не должны считать, что квантовая механика — это абстрактная теория, лишенная наглядности[13]. Конечно, признавая все это, мы хотели бы иметь возможность выводить прямо из наглядных основ, т. е. в сущности из соотношения (1), также и количественные законы квантовой механики. Поэтому Иордан пытается рассматривать уравнение

$$S(q, q'') = \int S(q, q')\, S(q', q'')\, dq'$$

---

[12] По Эренфесту и Брейту, это или невозможно совсем, или возможно только изредка, из-за сил, действующих на колесо.

[13] Шредингер характеризует квантовую механику как формальную теорию, абстрактность и отсутствие наглядности которой отпугивает и даже отталкивает. Конечно, проникновение математики (и в этом отношении наглядности) в квантовомеханические законы, к которому привела теория Шредингера, не может быть оценено в достаточной мере. Однако, в принципиальных физических вопросах популярная наглядность волновой механики, по-моему, уводит с прямого пути, указанного работами Эйнштейна и де Бройля, с одной стороны, и работами Бора, а также квантовой механикой, с другой стороны.

как соотношение для вероятности. Однако мы не можем присоединиться к такой точке зрения. Напротив, мы думаем, что наглядные основы когда-нибудь сделают возможным понимание количественных законов только по принципу наибольшей простоты. Если, например, X-координата электрона уже не будет «числом», как можно заключить экспериментально в соответствии с уравнением (1), то простейшее возможное предположение, не противоречащее (1), будет состоять в том, что эта X-координата представлена диагональными элементами некоторой матрицы, недиагональные элементы которой проявляются в неточности или каким-нибудь другим образом при преобразованиях (см., например, §4). Утверждение о том, что, например, скорость в X-направлении «в действительности» изображается не числом, а диагональными элементами некоторой матрицы, является, может быть, не более абстрактным и лишенным наглядности, чем утверждение о том, что напряженность электрического поля «в действительности» представляет собой временную часть антисимметричного тензора в мире пространства-времени. Слова «в действительности» будут здесь оправданы не в большей степени, чем при любом математическом описании явлений природы. Как только мы признаем, что все квантовотеоретические величины «в действительности» суть матрицы, мы без затруднений сможем вывести количественные законы.

Предполагая, что развитая здесь интерпретация квантовой механики, хотя бы в основных чертах, правильна, мы позволим себе сказать несколько слов о ее принципиальных последствиях. То, что квантовая теория, в противоположность классической, является существенно статистической теорией в том смысле, что в ней из точно заданных величин могут быть получены только статистические выводы, мы не предполагали. Ведь против таких предположений говорят, например, известные эксперименты Гейгера и Боте. Наоборот, во всех случаях, когда в классической теории имеются соотношения между величинами, каждая из которых может быть измерена действительно точно, соответствующие точные соотношения справедливы и в квантовой теории (законы сохранения импульса и энергии). Однако в точной формулировке закона причинности: «Если мы знаем точно настоящее, то мы можем вычислить будущее» ошибка имеет место в посылке, а не в выводе. Мы принципиально *не можем* знать настоящее во всех его подробностях. Поэтому все познание означает выборку из множества возможностей и ограничение будущих возможностей. Но поскольку статистический характер квантовой теории так тесно связан с неточностью всех ощущений, то можно было бы прийти к предположению, что за ощущаемым статистическим миром скрывается еще «истинный» мир, в котором действует закон причинности. Однако подобные умозрительные спекуляции представляются нам — мы особенно подчеркиваем это — неплодотворными и бессмысленными. Физика должна описывать формально только взаимосвязь между ощущениями. Истинное положение вещей, напротив, можно значительно лучше охарактеризовать так: поскольку все эксперименты подчиняются законам квантовой механики, а потому и соотношению (1), то квантовой механикой определенно устанавливается, что закон причинности недействителен.

Дополнение при корректуре. После окончания этой работы новые работы Бора привели к результатам, позволяющим существенно углубить и уточнить проделанный нами анализ квантовомеханических закономерностей. В этой связи Бор обратил мое внимание на то, что в некоторых местах своей работы я просмотрел существенные пункты. Прежде всего, неопределенность в наблюдаемых величинах обусловлена не одним только наличием дискретных величин; она непосредственно связана с требованием одновременно удовлетворять различным опытам, которые описываются с одной стороны, корпускулярной теорией, а с другой — волновой теорией. Например, при использовании воображаемого гамма-лучевого микроскопа

следует рассмотреть необходимое расхождение пучка лучей; это приводит к тому, что при наблюдении координат электрона направление комптоновской отдачи известно лишь с такой неточностью, которая удовлетворяет соотношению (1). Далее, недостаточно подчеркнуто, что простая теория эффекта Комптона строго применима только к свободным электронам. Вытекающая отсюда осторожность в применении соотношения неопределенностей, как выяснил проф. Бор, имеет, между прочим, существенное значение для всестороннего обсуждения перехода от микромеханики к макромеханике. Наконец, рассуждения о резонансной флюоресценции не вполне корректны, потому что связь между фазой света и фазой движения электрона не так проста, как предположено мной. Я приношу сердечную благодарность проф. Бору за то, что я получил возможность изучить и обсудить в процессе их проведения упомянутые новейшие исследования Бора, которые скоро будут опубликованы в работе о структуре понятий квантовой теории.

Копенгаген, Институт теоретической физики Университета

(*Поступила 23 марта 1927 г.*)

ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ К ПРОБЛЕМЕ АНОМАЛЬНОГО ЭФФЕКТА ЗЕЕМАНА*

Совместно с П. Иорданом

Уленбек и Гоудсмит привлекли для объяснения аномального эффекта Зеемана гипотезу Комптона о вращающемся электроне. Настоящая работа представляет собой попытку изучить квантовомеханические свойства модели атома, описываемой этой гипотезой. Показано, что гипотеза Комптона позволяет полностью объяснить эффект Зеемана и тонкую структуру дублетных спектров.

Изучение магнитных свойств атомных систем позволяет утверждать, что и по законам квантовой механики в атомных системах, состоящих из точечных зарядов, всегда наблюдается нормальный эффект Зеемана.

Для объяснения аномального эффекта Зеемана Уленбек и Гоудсмит привлекли гипотезу[1)] о том, что отдельный электрон является носителем магнитного момента $\mathbf{m}$ и соответствующего механического момента импульса $\mathbf{s}$. Моменты $\mathbf{m}$ и $\mathbf{s}$ должны быть связаны соотношением

$$\mathbf{m} = \frac{e}{mc}\mathbf{s}. \qquad (1)$$

Таким образом, отношение магнитного и механического момента должно отличаться на множитель 2 от значения $e/2mc$, которое оно принимает в атомной системе точечных зарядов. Мы не будем рассматривать здесь вопрос о том, какие аргументы за и против гипотезы о вращающемся электроне можно было бы выдвинуть с точки зрения электродинамики. Вместо этого мы исследуем квантовомеханические свойства модели Уленбека—Гоудсмита и сравним полученный результат с экспериментом. Как известно, применение к этой модели обычных квантовых правил до сих пор приводило к противоречию с экспериментом.

§ 1
Функция Гамильтона модели

В дальнейшем мы будем исходить из предположения, что электрон с зарядом $-e$, магнитным моментом $\mathbf{m}$ и моментом импульса $\mathbf{s}$[2)] ($\mathbf{m} = (e/mc)\mathbf{s}$) обращается вокруг

---

* Anwendung der Quantenmechanik auf das Problem der anomalen Zeemaneffekte. (Mit *P. Jordan*). — Zs. Phys., 1926, **37**, 5, 263–277. ***Перевод Ю. А. Данилова.***

1) Гипотеза о вращающемся электроне восходит к Комптону (*Compton A.* Journ. Frankl. Institute, 1921, **192**, 145). К интересующей нас проблеме эту гипотезу впервые применили Уленбек и Гоудсмит (*Uhlenbeck G. E., Goudsmit S.* Naturwiss., 1925, **13**, H. 47).

2) Согласно гипотезе Комптона—Уленбека—Гоудсмита, отдельный электрон обладает вполне определенным моментом импульса $\mathbf{s}$, а именно — моментом, удовлетворяющим квантовомеханическому соотношению $\mathbf{s}^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 s(s+1)$, где $s = 1/2$. Мы пока предпочитаем оставить величину момента импульса $\mathbf{s}$ неопределенной, чтобы иметь возможность рассматривать мультиплеты (триплеты, квартеты и т. д.), возникающие при связи нескольких электронных магнитов.

тяжелого ядра с зарядом $+Ze$, и обозначим момент импульса этого движения через $\mathbf{t}$. Магнитные свойства этой модели в точности совпадают со свойствами, предложенными Паули и Ланде и сослужившими столь большую службу при формальном упорядочении сложных спектров. Тонкую структуру и эффект Зеемана, возникающие при взаимодействии нескольких валентных электронов, в большинстве случаев удается свести к тонкой структуре и эффекту Зеемана простой модели, о которой мы только что упоминали.

Если пренебречь релятивистскими эффектами, влиянием внешнего поля и действием магнитного момента $\mathbf{m}$, то движение электрона описывается теорией атома водорода Паули—Дирака[3].

В интересующем нас случае энергию возмущения можно разделить на три части:

$$H = H_1 + H_1 + H_3.$$

1. Часть H_1, учитывающая влияние внешнего поля $\mathbf{H}$, по известным правилам определяется выражением

$$H_1 = \mathbf{H}\left(\frac{e}{2mc}\mathbf{t}\right) + \mathbf{H}\left(\frac{e}{mc}\mathbf{s}\right) = \frac{e}{2mc}\mathbf{H}(\mathbf{t} + 2\mathbf{s}). \tag{2}$$

2. Если считать, что центр тяжести электрона покоится, а ядро обращается вокруг электрона, то в том месте, где находится электрон, ядро создает магнитное поле

$$\mathbf{H}_i = \frac{eZ}{c}\frac{[\mathbf{rv}]}{r^3} = \frac{eZ}{mc}\frac{\mathbf{t}}{r^3}.$$

Этому полю соответствует ларморовская прецессия момента импульса $\bar{\mathbf{s}}$, величина которой составляет $(e/mc)\overline{\mathbf{H}}_i$. Как показал Томас[4], следует иметь в виду, что такая ларморовская прецессия наблюдается только в системах, в которых центр тяжести электрона покоится. Чтобы прецессия происходила в системе, необходимо еще выполнить некое преобразование Лоренца. Для ларморовской прецессии последней системы (а нас интересует именно такая система) Томас приводит величину $\frac{e^2Z}{2m^2c^2}\overline{\frac{1}{r^3}}\mathbf{t}$. В функции Гамильтона этому значению соответствует член

$$H_2 = \frac{e^2Z}{2m^2c^2}\overline{\frac{1}{r^3}}\mathbf{ts}. \tag{3}$$

3. Релятивистское изменение массы приводит по теории Зоммерфельда к возмущению энергии

$$H_3 = -\frac{1}{2mc^2}\left[W_0^2 + 2e^2ZW_0\overline{\frac{1}{r}} + e^4Z^2\overline{\frac{1}{r^2}}\right]. \tag{4}$$

Черта над членами, зависящими от r, означает усреднение по невозмущенному движению. В дальнейшем мы будем предполагать, что функция возмущения H имеет в квантовой механике такой же вид, как в классической механике и электродинамике. В обоснование подобного допущения мы сошлемся на то, что все входящие в H величины перестановочны и поэтому в соответствии с принципом соответствия вряд ли следует рассматривать функции H такого вида, который бы существенно отличался от приведенного нами. Мы не можем дать строгое обоснование выбранной нами функции возмущения из-за отсутствия последовательно развитой квантовотеоретической электродинамики.

[3] *Pauli W.* Zs. Phys., 1926, **36**, 336; *Dirac P.* Proc. Roy. Soc. London, March 1926, 110.

[4] *Thomas L. H.* Nature, 1926, **117**, 514.

§ 2
Ход рассуждений при вычислении возмущений

В приводимом ниже квантовомеханическом расчете мы предполагаем, что в невозмущенной системе абсолютные величины момента импульса t и магнитного момента s квантованы, то есть представимы диагональными матрицами. Для момента импульса t (напомним, что $t^2 = (n/2\pi)k(k+1)$), принятое нами допущение можно рассматривать как необоснованное, поскольку в невозмущенной системе возникает известное вырождение по k. Однако поскольку в энергию возмущения H входит лишь момент импульса t, а не сопряженная с t долгота перигелия, то при учете H квантование $|t|$, которое предполагалось, все же происходит. Физически это означает, что в исследуемой нами модели эффект Зеемана для атома водорода полностью аналогичен эффекту Зеемана для атомов щелочных элементов, величина же $|t|$ в щелочных атомах определяется взаимодействием с другими электронами. Аналогичные соображения можно было бы привести и относительно компоненты M_z полного момента импульса M атома в направлении поля. Исходная система в этом случае вырождена по $M_z = hm/2\pi$, но поскольку в энергию возмущения H входит лишь m, а не сопряженная с m угловая переменная, то H также приводит к квантованию M_z. Для упрощения вычислений мы можем таким образом предположить, что в исходной системе $|t|$, $|s|$ и M_z не вырождены и поэтому представимы в квантовой механике диагональными матрицами.

Если принять такое допущение, то исходная система останется вырожденной лишь по координате (см. полностью аналогичное рассмотрение модели в рамках классической механики[5]). Эту координату можно характеризовать компонентной $s_z = \frac{h}{2\pi}m_s$ собственного момента импульса s электрона и сопряженной угловой переменной, но можно задать и полным моментом импульса M атома и канонически сопряженной с ним угловой переменной.

Общий ход вычислений по методу теории возмущений в квантовой механике сводится к следующему[6].

Пусть задано некоторое решение p^0, q^0 невозмущенной задачи и зависимость функции возмущения от координат невозмущенной задачи. Если бы исходная система была невырожденной, то возмущение давало бы соответствующий вклад W в среднее по времени $\bar{H}$ функции возмущения по невозмущенному движению. Это среднее $\bar{H}$ само по себе есть диагональная матрица. Если же исходная система вырождена, то есть если значения энергии в состояниях $n+1, \dots, n+r$ совпадают, то среднее значение $\bar{H}$ энергии возмущения содержит дополнительные члены, соответствующие переходам между состояниями $n+1, \dots, n+r$, то есть $\bar{H}$ перестает быть диагональной матрицей.

В этом случае над переменными p^0, q^0 необходимо произвести каноническое преобразование

$$p' = S^{-1}p^0S, \quad q' = S^{-1}q^0S \qquad (5)$$

такое, что

$$W = S^{-1}\bar{H}S \qquad (6)$$

— диагональная матрица. Как и среднее $\bar{H}$, матрица преобразования S содержит только члены, соответствующие переходам между состояниями $n+1, n+2, \dots, n+r$

[5] *Pauli W.* Zs. Phys., 1923, **16**, 155; 1924, **20**, 371.

[6] *Born M., Heisenberg W., Jordan P.* Zs. Phys., 1926, **35**, 557 (в особенности гл. 3, § 2).

и диагональные члены. Найти матрицу преобразования S мы можем, решив r уравнений с неизвестными

$$WS_k - \sum_l H_{kl}S_l = 0 \quad (k, l = n+1, \dots, n+r). \tag{7}$$

Решения уравнений (7) существуют при r различных значениях W — «собственных значениях» задачи и одновременно приращениях энергии возмущенной системы. Если обозначить через * переход к комплексно-сопряженным величинам, а через $\sim$ — перестановку индексов, то для любых двух собственных значений W_n и W_m справедливы соотношения

$$\begin{aligned} W_nS_{kn} - \sum_l H_{kl}S_{ln} &= 0, \\ W_mS^*_{km} - \sum_l H^*_{kl}S^*_{lm} &= 0, \end{aligned} \tag{8}$$

откуда

$$(W_n - W_m)\sum_{k=n+1}^{n+r} S_{kn}S^*_{km} = 0.$$

Искомую матрицу преобразования S мы получим, введя нормировку

$$\sum_{k=n+1}^{n+r} S_{kn}S^*_{kn} = 1, \tag{9}$$

при которой $S\widetilde{S}^*$. Подставляя в (5), находим координаты возмущенной системы в рассматриваемом приближении.

§ 3
Вычисления

Применение этого метода к рассматриваемой задаче приводит к необходимости выполнить следующие общие вычисления.

1. Частью H_3 энергии возмущения, поскольку она не содержит вырожденных координат, сначала можно пренебречь, а затем включить в качестве аддитивной постоянной.

2. Согласно общих правил квантовой механики, момент импульса $\mathbf{t}$ и магнитный момент $\mathbf{s}$ удовлетворяет соотношениям

$$\begin{gathered} \mathbf{t}^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 k(k+1), \quad \mathbf{s}^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 s(s+1), \\ k_xk_y - k_yk_x = -\varepsilon k_z{}^{7)} \quad \left(\varepsilon = \frac{h}{2\pi i}\right), \end{gathered} \tag{10}$$

или, проще,

$$[\mathbf{tt}] = -\varepsilon\mathbf{t}, \quad [\mathbf{ss}] = -\varepsilon\mathbf{s}.$$

(квадратные скобки означают векторное произведение). Любая компонента момента импульса $\mathbf{t}$ коммутирует с любой компонентой магнитного момента $\mathbf{s}$.

[7] Поскольку в цитированной выше работе момент импульса был определен с противоположным знаком, то выполнялось соотношение $M_xM_y - M_yM_x = \varepsilon M_z$.

Если положить

$$k_z = m_k \frac{h}{2\pi}, \quad s_z = m_s \frac{h}{2\pi},$$

то

$$\begin{aligned} (k_x + ik_y)(k, m_k - 1; k, m_k) &= \frac{h}{2\pi}\sqrt{k(k+1) - m_k(m_k-1)}, \\ (k_x - ik_y)(k, m_k; k, m_k - 1) &= \frac{h}{2\pi}\sqrt{k(k+1) - m_k(m_k-1)}, \\ (s_x + is_y)(s, m_s - 1; s, m_s) &= \frac{h}{2\pi}\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}, \\ (s_x - is_y)(s, m_s; s, m_s - 1) &= \frac{h}{2\pi}\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}. \end{aligned} \tag{11}$$

Если вместо m_k ввести переменную m из соотношения $m = m_k + m_s$, то канонически сопряженной с m_s окажется разность «долгот узлов», канонически сопряженных до замены с m_k и m_s (см. упомянутые выше вычисления в рамках классической механики). Следовательно, должно выполняться соотношение

$$H_1 + H_2 = \frac{e}{2mc}\mathbf{H}(\mathbf{t} + 2\mathbf{s}) + \frac{e^2 Z}{2m^2c^2}\overline{\frac{1}{r^3}}\mathbf{ts}. \tag{12}$$

Вводя сокращенные обозначения

$$\frac{e}{2mc}|\mathbf{H}| = \frac{h}{2\pi} = \mu$$

и

$$\frac{1}{2}\frac{e^2 Z}{m^2c^2}\overline{\frac{1}{r^3}}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 = \lambda,$$

получаем:

$$H_1 + H_2 = \mu(k_z + 2s_z) + \lambda\left(k_z s_z + \frac{1}{2}(k_x + ik_y)(s_x - is_y) + +\frac{1}{2}(k_x - ik_y)(s_x + is_y)\right)$$

и

$$\begin{aligned} (H_1 + H_2)(m_s, m_s) &= \mu(m + m_s) + \lambda m_s(m - m_s), \\ (H_1 + H_2)(m_s, m_s - 1) &= \frac{1}{2}\lambda\sqrt{s(s+1) - m_s(m_s-1)}\, \times \\ &\quad \times \sqrt{k(k+1) - (m - m_s)(m - m_s + 1)}, \\ (H_1 + H_2)(m_s - 1, m_s) &= \frac{1}{2}\lambda\sqrt{[s(s+1) - m_s(m_s-1)}\, \times \\ &\quad \times \sqrt{k(k+1) - (m - m_s)(m - m_s + 1)}. \end{aligned} \tag{13}$$

Индексы m, k, s в левых частях этих равенств опущены как постоянные.

3. Число значений m_s, соответствующих данному набору значений k, s, m, определяется условиями

$$\begin{gathered} -s \leqslant m_s \leqslant +s \quad \text{и} \quad -k \leqslant m - m_s \leqslant +k, \\ \text{или} \quad k + m \geqslant m_s \geqslant -k + m. \end{gathered} \tag{14}$$

Матрицу преобразования S находим в соответствии с (7), решая линейные уравнения

$$WS_r - \sum H_{rl}S_l = 0, \tag{15}$$

где индексы r, l пробегают все значения, принимаемые m_s при заданном наборе k, s, m. Собственные значения W мы вычисляем, приравнивая нулю определитель с элементами $\delta_{rl}W - H_{rl}$. Если обозначить через m_1 наименьшее, а через m_2 наибольшее из значений, принимаемых m_s при заданном наборе k, s, m, то получается уравнение:

$$\begin{vmatrix} \mathrm{A} & \mathrm{B} & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \mathrm{B} & \mathrm{C} & -\frac{1}{2}\lambda\sqrt{\ldots} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \mathrm{D} & \mathrm{E} & 0 & \ldots & 0 \end{vmatrix} = 0, \tag{16}$$

где

$$\begin{aligned}
\mathrm{A} &= W - \mu(m + m_1) - \lambda m_1(m - m_1), \\
\mathrm{B} &= -\frac{1}{2}\lambda\sqrt{[s(s+1) - m_1(m_1+1)][k(k+1) - (m - m_1)(m - m_1 - 1)]}, \\
\mathrm{C} &= W - \mu(m + m_1 + 1) - \lambda(m_1 + 1)(m - m_1 - 1), \\
\mathrm{D} &= -\frac{1}{2}\lambda\sqrt{[s(s+1) - (m_1+1)(m_1+2)][k(k+1) - (m - m_1 - 1)(m - m_1 - 2)]}, \\
\mathrm{E} &= W - \frac{1}{2}\sqrt{\ldots}\,.
\end{aligned}$$

Итак, мы получаем для W алгебраическое уравнение степени $m_2 - m_1 + 1$ с коэффициентами, рациональными по k, s, m. Сумма корней равна коэффициенту при втором члене уравнения, взятом со знаком минус, и поэтому определяется соотношением

$$\sum_{n=m_1}^{m_2} W_n = \sum_{m=m_1}^{m_2} \mu(m + m_1) + \lambda m_1(m - m_1). \tag{17}$$

Линейность суммы $\sum\limits_{n=m_1}^{m_2} W_n$ по λ и μ составляет содержание так называемого «принципа суммирования» в эффекте Зеемана.

4. Чтобы проследить за ходом квантовомеханических вычислений во всех подробностях, разумно рассмотреть какой-нибудь пример. Мы выберем для этой цели дублетную модель, то есть $s = 1/2$.

В общем случае m_s может принимать значения $\pm 1/2$, но при $m = k + 1/2$ допустимым для m_s остается только значение $+1/2$, а при $m = k - 1/2$ — только значение $-1/2$. Таким образом, уравнение (16) вырождается в уравнение

$$\begin{vmatrix} W - \mu\left(m - \frac{1}{2}\right) + \lambda\left(m + \frac{1}{2}\right)\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\lambda\sqrt{k(k+1) - \left(m + \frac{1}{2}\right)\left(m - \frac{1}{2}\right)} \\ -\frac{1}{2}\lambda\sqrt{k(k+1) - \left(m + \frac{1}{2}\right)\left(m - \frac{1}{2}\right)} & W - \mu\left(m + \frac{1}{2}\right) - \lambda\frac{1}{2}\left(m - \frac{1}{2}\right) \end{vmatrix} = 0, \tag{18}$$

или

$$W^2 - \left(2\mu m - \frac{1}{2}\right)W + \mu^2\left(m^2 - \frac{1}{4}\right) - \mu\lambda m - \frac{\lambda^2}{4}k(k+1) = 0, \tag{19}$$

откуда

$$W = \mu m - \frac{\lambda}{4} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\mu^2 + 2\mu\lambda m + \lambda^2\left(k + \frac{1}{2}\right)^2}. \tag{20}$$

При $m = k + 1/2$ мы получаем $m_s = 1/2$ и

$$W = \mu\left(m + \frac{1}{2}\right) + \frac{\lambda}{2}\left(m - \frac{1}{2}\right), \tag{21}$$

а при $m = -k - \frac{1}{2}$, соответственно, $m_s = -\frac{1}{2}$ и

$$W = \mu\left(m - \frac{1}{2}\right) - \frac{\lambda}{2}\left(m + \frac{1}{2}\right). \tag{22}$$

Если для краткости ввести новую переменную

$$v = \frac{\lambda}{\mu}\left(k + \frac{1}{2}\right),$$

то

$$W = \mu\left(m - \frac{v}{k + \frac{1}{2}} \pm \sqrt{1 + 2\frac{m}{k + \frac{1}{2}}v + v^2}\right) \tag{23}$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} W_{m=k+\frac{1}{2}} &= \mu\left[m\left(1 + \frac{v}{2k+1}\right) - \frac{v}{k+\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}\right] = \mu\left[k + 1 + v\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{k+\frac{1}{2}}\right)\right], \\ W_{m=-k-\frac{1}{2}} &= \mu\left[m\left(1 - \frac{v}{2k+\frac{1}{2}}\right) - \frac{v}{k+\frac{1}{2}} - \frac{1}{2}\right] = \mu\left[-k - 1 + v\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{k+\frac{1}{2}}\right)\right]. \end{aligned} \tag{23'}$$

Равенства (23), (23′) совпадают с известными формулами для дублета в теории связи Фойгта[8].

5. Перейдем к вычисления интенсивностей. Чтобы найти матрицу преобразования S, решим уравнение

$$WS_{-\frac{1}{2}} - (H_1 + H_2)\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)S_{-\frac{1}{2}} - (H_1 + H_2)\left(-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right)S_{+\frac{1}{2}} = 0. \tag{24}$$

Оказывается, что

$$\begin{aligned} S_{+\frac{1}{2}} &= C\left(W - \mu\left(m - \frac{1}{2}\right) + \frac{\lambda}{2}\left(m + \frac{1}{2}\right)\right), \\ S_{-\frac{1}{2}} &= C\frac{\lambda}{2}\sqrt{k(k+1) - \left(m^2 - \frac{1}{4}\right)}, \end{aligned} \tag{25}$$

где C — пока произвольная постоянная. Если мы условимся различать оба значения W и обозначим их $W_{+\frac{1}{2}}$ и $W_{-\frac{1}{2}}$, то

---

[8] См., например, *Sommerfeld A.* Zs. Phys., 1922, **8**, 257.

$$
\begin{aligned}
S_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} &= C_{+\frac{1}{2}}\left[W_{+\frac{1}{2}} - \mu\left(m-\frac{1}{2}\right)+\frac{\lambda}{2}\left(m+\frac{1}{2}\right)\right] = \\
&= \frac{1}{2}C_{+\frac{1}{2}}\left[\mu+\lambda m+\sqrt{\mu^2+2\lambda\mu m+\lambda^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2}\right], \\
S_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} &= C_{+\frac{1}{2}}\frac{\lambda}{2}\sqrt{k(k+1)-\left(m^2-\frac{1}{4}\right)}, \\
S_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} &= \frac{1}{2}C_{-\frac{1}{2}}\left[\mu+\lambda m-\sqrt{\mu^2+2\lambda\mu m+\lambda^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2}\right], \\
S_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= C_{-\frac{1}{2}}\sqrt{k(k+1)-\left(m^2-\frac{1}{4}\right)}.
\end{aligned}
\qquad (26)
$$

Из условия нормировки (9) следует, что

$$
|C_{+\frac{1}{2}}| = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(\mu+\lambda m+\sqrt{\mu^2+2\lambda\mu m+\lambda^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2}\right)\sqrt{\mu^2+2\lambda\mu m+\lambda^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2}}},
$$

$$
|C_{-\frac{1}{2}}| = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}\left(-\mu-\lambda m+\sqrt{\mu^2+2\lambda\mu m+\lambda^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2}\right)\sqrt{\mu^2+2\lambda\mu m+\lambda^2\left(k+\frac{1}{2}\right)^2}}}.
\qquad (27)
$$

В частном случае при $m = \pm(k+1/2)$, поскольку всякое вырождение отсутствует, мы получаем (см. (21) и (22)):

$$
\begin{aligned}
S_{+\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} &= 1, \quad S_{+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = 0, \\
S_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} &= 1, \quad S_{-\frac{1}{2},+\frac{1}{2}} = 0.
\end{aligned}
\qquad (28)
$$

Для вычисления интенсивностей остается лишь подставить соотношения (26), (27) и (28) в преобразование (5). В качестве p^0, q^0 следует взять решения невозмущенной системы. Необходимо иметь в виду, что координаты q^0 электрона являются диагональными матрицами относительно m_s.

Мы ограничимся рассмотрением переходов $k \to k-1$, поскольку переходы $k \to k+1$ не дают ничего нового.

Из работы Борна, Гейзенберга и Иордана (соотношение (33) из главы 4) получаем:

$$
\begin{aligned}
q_z^0(k,m,m_s;k-1,m,m_s) &= A(k)\sqrt{k^2-(m-m_s)^2}, \\
(q_x+iq_y)(k,m-1,m_s;k-1,m,m_s) &= A(k)\sqrt{(k-m+m_s)(k-m+m_s+1)}, \\
(q_x-iq_y)(k,m,m_s;k-1,m-1,m_s) &= A(k)\sqrt{(k+m-m_s)(k+m-m_s-1)},
\end{aligned}
\qquad (29)
$$

где $A(k)$ означает величину, зависящую только от k.

Подставляя соотношения (26) —(29) в преобразование (5), получаем после несложных вычислений интенсивности. Общие формулы довольно громоздки. Мы приведем лишь интенсивности для частного случая линий D-типа, то есть рассмотрим переходы $k = 0 \to k = 1$. Из (5) получаем:

$$
\begin{aligned}
|q_z'|^2\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}|A^2(1)|\left(1 + \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_z'|^2\left(1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}|A^2(1)|\left(1 - \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_z'|^2\left(1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}|A^2(1)|\left(1 + \frac{-\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_z'|^2\left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}|A^2(1)|\left(1 - \frac{-\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_x' + iq_y'|^2\left(1, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= |A^2(1)|\left(1 + \frac{\mu - \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_x' + iq_y'|^2\left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= |A^2(1)|,\left(1 - \frac{\mu - \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 - \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_x' + iq_y'|^2\left(1, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= 2|A^2(1)|,\\
|q_x' - iq_y'|^2\left(1, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= 2|A^2(1)|,\\
|q_x' - iq_y'|^2\left(1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= |A^2(1)|,\left(1 - \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right),\\
|q_x' - iq_y'|^2\left(1, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= |A^2(1)|,\left(1 + \frac{\mu + \frac{1}{2}\lambda}{\sqrt{\mu^2 + \lambda\mu + \frac{9}{4}\lambda^2}}\right).
\end{aligned}
\tag{30}
$$

Эти формулы для интенсивностей также совпадают с формулами, выведенными из теории Фойгта[9)].

§ 4
Предельные случаи $\lambda \ll \mu$ и $\mu \ll \lambda$

Чтобы облегчить сравнение эмпирических данных с теорией, мы сочли целесообразным вывести результаты теории заново в двух предельных случаях: при $\lambda \ll \mu$

[9)] См. *Sommerfeld A.* Op. cit.

и при $\mu \ll \lambda$. Предельный случай $\lambda \ll \mu$ непосредственно следует из вычислений, приведенных в предыдущем параграфе. Например, в первом приближении определитель (16) распадается в произведение диагональных членов, а

$$W = (H_1 + H_2)(m_s, m_s).$$

Для вычислений в предельном случае $\mu \ll \lambda$ необходимы новые соображения. Положим сначала $\mu = 0$. Тогда $H_1 = 0$ и от H_2 остается член, пропорциональный $\mathbf{ts}$. Далее целесообразно ввести полный момент импульса $\mathbf{M}$ атома:

$$\mathbf{M} = \mathbf{t} + \mathbf{s}.$$

В силу перестановочности $\mathbf{t}$ и $\mathbf{s}$ получаем:

$$\mathbf{M}^2 = \mathbf{t}^2 + \mathbf{s}^2 + 2\mathbf{ts}. \tag{31}$$

С другой стороны, поскольку

$$\mathbf{M}^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 j(j+1),$$

то

$$\begin{aligned} \left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 \mathbf{ts} &= \frac{1}{2}\big(j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)\big), \\ H_2 &= \frac{1}{2}\lambda\big(j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)\big). \end{aligned} \tag{32}$$

•Как функция от j энергия возмущения H — диагональная матрица.

При малых значениях μ систему, характеризуемую соотношениями (32), можно рассматривать как «невозмущенную». Таким образом, в невозмущенной системе атом прецессирует вокруг оси полного момента импульса. Значения энергии возмущенной системы можно найти, вычислив временное среднее от H_1 по невозмущенному движению. Если $\mathbf{t}$ и $\mathbf{s}$ считать разложенными на компоненты, параллельные и ортогональные вектору $\mathbf{M}$, то вследствие прецессии ортогональные компоненты при усреднении выпадут и вклад в H_1 дадут лишь компоненты, параллельные $\mathbf{M}$.

Эти соображения, заимствованные из классической механики, нам удалось перенести в квантовую механику потому, что все величины, с которыми нам пришлось иметь дело, коммутируют.

Рассмотрим компоненты моментов $\mathbf{t}$ и $\mathbf{s}$ в направлении вектора $\mathbf{M}$:

$$\begin{aligned} (\text{компонента } \mathbf{t}) &= \frac{(\mathbf{Mt})}{\mathbf{M}^2}\mathbf{M}, \\ (\text{компонента } \mathbf{s}) &= \frac{(\mathbf{Ms})}{\mathbf{M}^2}\mathbf{M}. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{e}{2mc}\mathbf{HM}\left(\frac{(\mathbf{Mt})}{\mathbf{M}^2} + 2\frac{(\mathbf{Ms})}{\mathbf{M}^2}\right) = \frac{e}{2mc}\mathbf{HM}\left(1 + \frac{(\mathbf{Ms})}{\mathbf{M}^2}\right) = \\ &= \mu m\left(1 + \frac{j(j+1) - k(k+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\right), \end{aligned} \tag{33}$$

и, наконец, при $\mu \ll \lambda$ получаем:

$$\overline{H_1 + H_2} = \mu m\left(1 + \frac{j(j+1) - k(k+1) + s(s+1)}{2j(j+1)}\right) + \\ + \frac{1}{2}\lambda\big(j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)\big). \quad (34)$$

Соотношение (34) совпадает с формулами Ланде (факторы g и γ, «пропорции интервалов»).

§ 5
Вычисление тонкой структуры в отсутствие поля

Проведенные ранее расчеты показали, что гипотеза Уленбека—Гоудсмита позволяет качественно описывать эффект Зеемана и пропорции интервалов в согласии с экспериментом.

Для решения вопроса, позволяет ли гипотеза Уленбека—Гоудсмита, положенная в основу настоящей работы, получить правильные абсолютные величины интервалов, необходимо вычислить значения λ и H_3.

Задача сводится к вычислению средних значений

$$\overline{\frac{1}{r}}, \quad \overline{\frac{1}{r^2}}, \quad \overline{\frac{1}{r^3}}.$$

Все вычисления мы будем производить для двумерного атома водорода[10]. В этом случае энергия невозмущенного атома равна

$$H_0 = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) - \frac{e^2 Z}{r};$$

$$p_x x - x p_x = \frac{h}{2\pi i}, \quad p_y y - y p_y = \frac{h}{2\pi i}, \quad (35)$$
$$xy - yx = 0, \quad p_x p_y - p_y p_x = 0.$$

Если ввести полярные координаты по формулам

$$r^2 = x^2 + y^2, \quad p_r = m\dot{r}, \quad \varphi = \operatorname{arctg}\frac{y}{x}, \quad (36)$$
$$p_\varphi = m(x\dot{y} - y\dot{x}) = mr^2\dot{\varphi},$$

то

$$H_0 = \frac{1}{2m}\left[p_r^2 + \frac{1}{r^2}\left(p_\varphi - \frac{1}{4}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\right)\right] - \frac{e^2 Z}{r},$$
$$p_r r - r p_r = \frac{h}{2\pi i}, \quad p_\varphi \varphi - \varphi p_\varphi = \frac{h}{2\pi i}, \quad (36a)$$
$$r\varphi - \varphi r = 0, \quad p_r p_\varphi - p_\varphi p_r = 0.$$

Как показано в работе «Квантовая механика II» (глава 6) (с. 163, соотношение (17)), на которую мы неоднократно ссылались, p_φ квантуется по формуле

$$p_\varphi = m_0\frac{h}{2\pi},$$

[10] Средние значения для трехмерного случая были вычислены В. Паули. Полученные им результаты совпадают с приведенными выше.

причем согласие с результатами Паули[11] достигается, если предположить, что число m_0 полуцелое. При этом $m_0 - \frac{1}{2}$ совпадает с введенным выше k. Как показал Паули, функция Гамильтона имеет в трехмерной задаче вид

$$H_0 = \frac{1}{2m}\left(p_r^2 + \frac{1}{r}\mathfrak{k}^2\right) - \frac{e^2 Z}{r}. \tag{37}$$

Чтобы соотношения (36а) и (37) совпадали, необходимо положить

$$k^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)k(k+1) = p_\varphi^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\left(m_0^2 - \frac{1}{4}\right).$$

Среднее значение $\overline{\frac{1}{r}}$ мы получаем из уравнения («Квантовая механика II» (глава 6), с. 163, соотношение (17)):

$$-\frac{\overline{Ze^2}}{r} = \overline{E}_{\text{потен}} = -2\overline{E}_{\text{кин}} = 2W_0. \tag{38}$$

Здесь

$$W_0 = H_0 = -\frac{RhZ^2}{n^2},$$

где n — целое число. Далее, следуя Паули, получаем из уравнений движения

$$\frac{d}{dt}p_r = -\frac{\partial H_0}{\partial r} = -\frac{1}{mr^3}\left[p_\varphi^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{h}{2\pi}\right)\right] + \frac{e^2 Z}{r^2} \tag{39}$$

и после усреднения по времени находим

$$\overline{\frac{e^2 Z}{r^2}} = \overline{\frac{1}{mr^3}}\left[p_\varphi^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2\right]. \tag{40}$$

Наконец, из (36) следует, что

$$\begin{aligned} mr^2\dot{\varphi} &= p_\varphi, \\ \frac{\bar{p}_\varphi}{mr^2} &= \bar{\dot{\varphi}}. \end{aligned} \tag{41}$$

Если представить, что введены угловые переменные, сопряженные с главным квантовым числом n и с соответствующими ему переменными действия $J = nh$[12], по аналогии с классической теорией будет выполняться соотношение

$$\bar{\dot{\varphi}} = 2\pi\dot{w} = -2\pi\frac{\partial H_0}{\partial J} = +\frac{4\pi RZ^2}{n^3}. \tag{42}$$

---

[11] *Pauli W.* Zs. Phys., 1926, **36**, 336; *Dirac P.* Proc. Roy. Soc. London, March 1926, 110.

[12] Введение таких переменных было обосновано Борном и Винером (Zs. Phys., 1926, **36**, 174) и Дираком (*Dirac P.* Proc. Roy. Soc. London, March 1926, 110).

Наконец, если воспользоваться соотношением $p_\varphi = \frac{h}{2\pi}\left(k+\frac{1}{2}\right)$, то из равенств (38), (40), (41) и (42) будет следовать, что

$$\begin{aligned} \overline{\frac{1}{r}} &= \frac{1}{e^2}\frac{2RhZ}{n^2}, \\ \overline{\frac{1}{r^2}} &= \frac{m}{p_\varphi}\overline{\dot\varphi} = \frac{m}{\frac{h}{2\pi}\left(k+\frac{1}{2}\right)}\frac{4\pi RZ^2}{n^3} = \frac{8\pi^2 mRZ^2}{h\left(k+\frac{1}{2}\right)n^3}, \\ \overline{\frac{1}{r^3}} &= \overline{\frac{1}{r^2}}\frac{e^2Zm}{p_\varphi^2 - \frac{1}{4}\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2} = \frac{m^2e^2RZ^3\cdot 32\pi^4}{k\left(k+\frac{1}{2}\right)(k+1)n^3h^3}. \end{aligned} \tag{43}$$

Таким образом, из (2)–(4), (34) и (43) мы получаем, что в отсутствие внешнего поля полная энергия возмущения определяется выражением

$$\begin{aligned} H_2 + H_3 &= \frac{1}{2}\frac{e^2Z}{m^2c^2}\frac{4\pi^2m^2e^2RZ^3\left(j(j+1)-k(k+1)-s(s+1)\right)}{hk\left(k+\frac{1}{2}\right)(k+1)n^3} - \\ &\quad - \frac{1}{2mc^2}\left(-\frac{3R^2h^2Z^4}{n^4} + \frac{8\pi^2me^4RZ^4}{h\left(k+\frac{1}{2}\right)n^3}\right) = \\ &= \frac{2R^2h^2Z^4}{n^3mc^2}\left(\frac{j(j+1)-k(k+1)-s(s+1)}{2k\left(k+\frac{1}{2}\right)(k+1)} - \frac{1}{k+\frac{1}{2}} + \frac{3}{4\pi}\right). \end{aligned} \tag{44}$$

Для дублетных атомов, то есть для спектра водорода, щелочных элементов и рентгеновских спектров, возможна точная экспериментальная проверка этой формулы: как показывает опыт, два уровня энергии *с различными* k, но *с одним и тем же* j совпадают (если пренебречь взаимодействием между электронами). Расстояние между двумя уровнями с одним и тем же k и различными j задается формулой тонкой структуры Зоммерфельда.

Подставляя в (44) значения $s = 1/2$, $j = k \pm 1/2$, получаем:

$$H_2 + H_3 = \begin{cases} \dfrac{2R^2h^2Z^4}{n^3mc^2}\left(\dfrac{1}{2j\left(j+\frac{1}{2}\right)} - \dfrac{1}{j} + \dfrac{3}{4n}\right) = \\ \quad = \dfrac{2R^2h^2Z^4}{n^3mc^2}\left(-\dfrac{1}{j+\frac{1}{2}} + \dfrac{3}{4n}\right) \quad \text{при } k = j - 1/2; \\ \dfrac{2R^2h^2Z^4}{n^3mc^2}\left(-\dfrac{1}{2\left(j+\frac{1}{2}\right)(j+1)} - \dfrac{1}{j+1} + \dfrac{3}{4n}\right) = \\ \quad = \dfrac{2R^2h^2Z^4}{n^3mc^2}\left(-\dfrac{1}{j+\frac{1}{2}} + \dfrac{3}{4n}\right) \quad \text{при } k = j + \dfrac{1}{2}. \end{cases} \tag{45}$$

Следовательно, вообще при $s = 1/2$

$$H_2 + H_3 = \frac{2R^2h^2Z^4}{n^3mc^2}\left(-\frac{1}{j+\frac{1}{2}} + \frac{3}{4n}\right). \tag{46}$$

Формула (46) находится в полном согласии с экспериментальными данными. В частности, то обстоятельство, что число k не входит в (46), позволяет объяснить в рамках теории Уленбека—Гоудсмита «дублет экранирования». Получающиеся из (46) расщепления магнитных дублетов согласуются с формулой тонкой структуры Зоммерфельда.

Хотя на вопрос о том, насколько свободна от произвола теория, основанная на предположениях (2)–(4), мы еще не можем дать ответа, все же результаты проведенных нами вычислений можно рассматривать как важное подтверждение с одной стороны гипотезы Комптона—Уленбека—Гоудсмита, а с другой стороны — квантовой механики.

О СПЕКТРАХ АТОМНЫХ СИСТЕМ С ДВУМЯ ЭЛЕКТРОНАМИ*

В этой работе в качестве частного примера квантовой механики задач многих тел, дающей основу для их решения путем изучения характеристического явления резонанса, рассматриваются атомные системы с двумя электронами и их спектры. Результаты удовлетворительно воспроизводят наиболее существенные свойства этих спектров.

Атом гелия и родственные ему ионы Li^+, Be^{++} и т. д., неоднократно были предметом обстоятельных исследований с позиций прежней квантовой теории [1]. Исследование этой проблемы с применением новой квантовой механики до сих пор не проводилось. Основу для такого исследования мы видим в характеристическом для квантовомеханической задачи многих тел явлений резонанса, которое недавно было рассмотрено автором в этом журнале [2]. В следующих ниже вычислениях рассматриваются движения электронов в атоме гелия в той мере, в какой в квантовой механике можно говорить о движениях, спектр He и Li^+ выводится из законов квантовой механики качественно и в грубом приближении количественно. Эти вычисления проводились методом последовательного применения простейшей теории возмущений. Однако ряды теории возмущений хорошо сходятся только для высоковозбужденных состояний атома $(D, d, F, f, \dots)$; для термов (P, p) уже первое найденное здесь этими рядами приближение весьма неточно, для термов (S, s) или для нормального состояния оно непригодно совсем. Более точное количественное вычисление спектра может быть выполнено, если будут разработаны уточненные методы, обеспечивающие быструю сходимость рядов, аналогичные, например, развитым Крамерсом при исследовании нормального состояния He на основе прежней квантовой теории. Однако цель данной работы состоит в получении только таких результатов, какие могут быть получены при систематическом применении обычной теории возмущений.

I

ВЫЧИСЛЕНИЕ СПЕКТРА БЕЗ УЧЕТА ЭЛЕКТРОННЫХ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ

§1

В соответствии с вычислениями в названной выше работе автора сначала должно быть известно состояние «невозмущенного» атома, в котором взаимодействие между

---

* Über die Spektra von Atomsystemen mit zwei Elektronen. — Zs. Phys., 1926, **39**, 499–518. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Landé A.* Zs. Phys., 1919, **20**, 228; *Borh N.* Göttinger Vortrage (не опубликовано); *Kramers H. A.* Zs. Phys., 1923, **13**, 312; *van Vleck J. H.* Phys. Rev., 1923, **21**, 372; *Born M., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1924, **26**, 26.

[2] *Heisenberg W.* Mehrkorperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik. Zs. Phys., 1926, **38**, 411. — Русский перевод: с. 176–186.

электронами не учитывается. Таким образом, чтобы действовать совершенно последовательно, надо было бы брать в качестве невозмущенной системы атом с двумя электронами, в котором оба электрона движутся под воздействием заряда ядра, не взаимодействуя друг с другом. Однако такой подход был бы весьма далек от цели, так как в возбужденных состояниях атома на один электрон приближенно действует заряд ядра Z, а на другой электрон — заряд ядра $Z-1$ вследствие экранирования. Поэтому при расчетах по классической механике естественным исходным состоянием атома было бы такое, в котором на один *определенный* электрон действует заряд ядра Z, на другой — заряд $Z-1$. В квантовой механике такое исходное состояние давало бы плохое приближение, так как оба электрона периодически обмениваются местами, а потому то один, то другой электрон испытывают воздействие заряда Z или $Z-1$. Для квантовой механики скорее всего подходит, по-видимому, такое исходное состояние, в котором сила, действующая на каждый электрон, вблизи ядра определяется зарядом Z, на некотором удалении — зарядом $Z-1$. Таким образом, можно представить себе, что вокруг ядра расположена равномерно заряженная сферическая оболочка (с полным зарядом e и радиусом r_0). Тогда в невозмущенном атоме потенциальная энергия электрона выглядит следующим образом:

$$-\frac{e^2Z}{r}+f(r),\quad f(r)=\begin{cases}\frac{e^2}{r_0} & \text{от}\quad r=0\quad\text{до}\quad r=r_0,\\ \frac{e^2}{r} & \text{от}\quad r=r_0\quad\text{до}\quad r=\infty.\end{cases}\tag{1}$$

Входящий сюда радиус r_0 должен быть определен дополнительно так, чтобы ряды теории возмущений сходились как можно лучше.

Итак, для строгого количественного расчета значений термов теперь надо было бы точно вычислить значения энергии и Шредингеровские волновые функции механической системы с потенциальной энергией (1), что не составило бы особых математических трудностей. Однако в нашем приближенном расчете мы можем обойтись без этого вычисления, так как решение задачи с потенциальной энергией (1) практически полностью совпадает с решением для механической системы с зарядом ядра Z или $Z-1$, в зависимости от положения r_0 относительно «радиуса орбиты». Возьмем, например, p-орбиту. По классической теории решение задачи с потенциальной энергией (1) было бы *тождественно* решению для системы с зарядом $Z-1$, если $r_0 < 2a/(Z-1)$, $a=h^2/4\pi^2me^2$. В квантовой механике этого тождества уже не существует, но указанные два решения во многих отношениях различаются очень мало. Для решений задачи с потенциальной энергией (1), в которых — если применять простые обозначения прежней теории — радиус орбиты существенно меньше r_0, следует учитывать, что энергия отличается на аддитивную величину e^2/r_0 от энергии системы, характеризуемой зарядом ядра Z.

Для упрощения дальнейших вычислений мы можем еще предполагать, что в невозмущенной системе проекция полного момента на заданное внешнее направление и сам полный момент «квантованы», т.е. что матрицы их диагональны. Тем самым мы вводим дополнительно фиктивные поля, снимающие вырождение по числам j и m уже в невозмущенной системе; это оправдывается тем, что j квантуется энергией возмущения, которую m создает при сколь угодно малом внешнем поле. Но и тогда в общем случае в невозмущенной системе остается тройное вырождение: резонансное и еще по импульсам электронов k_1 и k_2 [3]. В частном же случае,

[3] В действительности решения задачи (1), соответствующие одинаковым значениям n и разным значениям k, приводят к несколько различающимся значениям энергии. Однако эти различия в энергии в общем случае настолько малы, что более последовательно включать их в энергию возмущения и считать невозмущенную систему вырожденной.

когда один электрон находится на основной орбите и $n = 1$, вырождение по *обоим* импульсам отпадает и остается одно только резонансное вырождение; это следует из простого подсчета числа невозмущенных состояний с одинаковой энергией. На опыте известны только термы этого последнего типа, Поэтому и мы можем удовлетвориться расчетами именно таких термов.

Итак, пусть в невозмущенной системе один электрон находится на орбите $1S$. Если мы исключим те состояния полной системы, в которых второй электрон движется по S-орбите — ведь для таких состояний наш приближенный метод не пригоден, — то для r_0 всегда можно будет выбрать значение существенно большее «радиуса $1S$-орбиты». Энергия этого одного электрона, следовательно, имеет в первом приближении вид $-\frac{RhZ^2}{1^2} + \frac{e^2}{r_0}$, во втором приближении —

$$-\frac{RhZ^2}{1^2} + \frac{e^2}{r_0} + \overline{\left(f(r) - \frac{e^2}{r_0}\right)}. \tag{2}$$

Черта означает усреднение по времени, произведенное по невозмущенному движению на орбите для $n = 1$ и заряда Z. Аналогично, энергия другого электрона в невозмущенной системе определяется формулой

$$-\frac{Rh(Z-1)^2}{n^2} + \overline{\left(f(r) - \frac{e^2}{r}\right)}. \tag{3}$$

Здесь r_0 существенно меньше, чем радиус орбиты. Усреднение производится по орбите, характеризуемой главным квантовым числом n, определенным импульсом k и зарядом $(Z - 1)$. При перестановке двух электронов полная энергия сохраняется.

Энергия возмущения определяется кулоновским отталкиванием двух электронов, уменьшенным на отклонение потенциала (1) от потенциала ядра с зарядом Z. Это дает

$$H^1 = \frac{e^2}{r_{12}} - f(r_1) - f(r_2). \tag{4}$$

Здесь r_{12} означает расстояние между двумя электронами, r_1 и r_2 —расстояние от ядра электрона 1 и 2, соответственно.

§2

Рассмотрим теперь одно совершенно особое состояние невозмущенного атома, характеризуемое полным моментом j и проекцией его m на фиксированную ось; допустим, что один электрон находится на орбите с $n_1 = 1$, второй — на орбите с $n_2 = n \geqslant 2$. Поскольку второй электрон движется по S-орбите, момент импульса k орбиты первого электрона равен полному моменту атома:

$$k = j. \tag{5}$$

Система будет вырожденной еще только в том смысле, что при перестановке двух электронов полная энергия ее не изменяется, и потому к ней может быть применен полностью метод статьи, цитированной ранее[4]. Если мы введем для состояния, характеризуемого квантовыми числами $n = 1$, $k = 0$, $m = 0$ обозначение v, для состояния с квантовыми числами $n = n$, $k = j$, $m = m$ обозначение w и далее будем обозначать первым или вторым индексом состояние первого или второго электрона,

[4] *Heisenberg W.* Mehrkorperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik.

то в соответствии с соображениями цитированной статьи, см. уравнения (10)–(12), вычисление вековых движений может быть сведено в основном к расчету членов

$$H^1(vw; vw) \quad \text{и} \quad H^1(vw; wv). \tag{6}$$

Эти два члена не зависят от m, так как без внешнего поля направление в пространстве выделить невозможно. Следовательно, каждый терм невозмущенной системы расщепляется на два; только те термы невозмущенной системы, в которых электроны были на эквивалентных орбитах, остаются простыми. Мы будем называть две системы термов, на которые распадается спектр термов, о(рто)- и п(ара)-системой, причем последнее название будем применять к той системе, которая содержит состояние с эквивалентными орбитами. Вычислив значения (6), мы покажем, что значения энергии для п-системы больше, чем для о-системы, и что вычисленное расстояние между ними приблизительно соответствует эмпирическому расстоянию между термами орто- и парагелия или орто- и паралития. Тот факт, что обе системы термов не комбинируют между собой, был уже показан в цитированной статье.

Расчет значений (6) проще всего производится по методу собственных функций Шредингера[5]. Для водородоподобного атома с зарядом ядра Z Шредингеровская собственная функция ψ, соответствующая квантовым числам n, k, m, может быть представлена в виде произведения трех функций, из которых каждая зависит только от одной из трех переменных r, θ, φ:

$$\psi_{n,k,m} = X_{nk}(r)Y_{km}(\theta)Z_m(\varphi). \tag{7}$$

Если мы введем обозначение $d\Omega$ для пространственного элемента $drr^2\, d\theta \sin\theta\, d\varphi$ и возьмем два каких-нибудь «стационарных состояния» или собственных значения s, t, то при соответственной нормировке ψ будет справедливо соотношение ортогональности:

$$\int \psi_s\bar{\psi}_t\, d\Omega = \delta_{st} = \begin{cases} 1, & s = t, \\ 0, & s \neq t. \end{cases} \tag{7a}$$

Черта над ψ обозначает комплексно сопряженную величину. По Шредингеру[6], функции X, Y, Z имеют вид

$$\begin{aligned} X_{n,k}(r) &= \sqrt{\left(\frac{2Z}{na}\right)^3 \frac{(n-k-1)!}{(n+k)!2n}}\, e^{-\xi/2}\xi^k \sum_0^\infty \frac{(-\xi)^\zeta}{s!} \binom{n+k}{n-k-1-s}, \\ &a = \frac{h^2}{4\pi m e^2}, \quad \xi = \frac{2Z}{na}r; \\ Y_{km}(\theta) &= \sqrt{\left(k+\frac{1}{2}\right)\frac{(k-m)!}{(k+m)!}}\, P_{km}(\cos\theta), \\ &P_{km}(t) = \left(1-t^2\right)^{m/2}\frac{d^m}{dt^m}P_k(t), \quad P_k(t) = \frac{1}{2^k k!}\frac{d^k}{dt^k}\left(1-t^2\right)^k; \\ Z_m(\varphi) &= \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned} \tag{8}$$

---

[5] *Schrödinger E.* Ann. Phys. 1926, **79**, 361, 489, 734.

[6] *Schrödinger E.* Ann. Phys., 1926, **79**, 361. Нормировочные постоянные взяты мною из работы *Waller I.* Zs. Phys., 1926, **38**, 635.

Вычисление величин (6) производится теперь по формулам

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\ H^1(vw, vw) = \int\dots\int H^1\psi_{v,Z}(r_1,\theta_1,\varphi_1)\psi_{w,Z-1}(r_2,\theta_2,\varphi_2)\times\\
&\qquad\qquad\qquad\times\bar{\psi}_{v,Z}(r_1,\theta_1,\varphi_1)\bar{\psi}_{w,Z-1}(r_2,\theta_2,\varphi_2)\,\Omega_1\,d\Omega_2,\\
&\text{b)}\ H^1(vw, wv) = \int\dots\int H^1\psi_{v,Z}(r_1,\theta_1,\varphi_1)\psi_{w,Z-1}(r_2,\theta_2,\varphi_2)\times\\
&\qquad\qquad\qquad\times\bar{\psi}_{w,Z-1}(r_1,\theta_1,\varphi_1)\bar{\psi}_{v,Z}(r_2,\theta_2,\varphi_2)\,\Omega_1\,d\Omega_2.
\end{aligned}\tag{9}$$

При этом, следовательно, предполагается, что собственные функции задачи (1) отличаются от водородоподобных собственных функций не слишком сильно. Из этих двух величин вторая, $H^1(vw, wv)$, в соответствии с выводами цитированной статьи, определяет половину расстояния между о- и п-термами «возмущенной» системы. Первая величина, $H^1(vw, vw)$, определяет расстояние от середины промежутка между орто- и паратермом до терма невозмущенной системы. По-видимому, целесообразно прибавить к этому расстоянию отклонение энергии невозмущенного атома (2) и (3) от величины

$$-\frac{RhZ^2}{1^2}-\frac{Rh(Z-1)^2}{n^2}.$$

Тогда для расстояния середины указанного промежутка от $-RhZ^2/1^2-Rh(Z-1)^2/n^2$ мы получаем

$$H^1(vw, vw) = \int\dots\int\left(\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_2}\right)|\psi_{\theta,Z}(r_1,\theta_1,\varphi_1)|^2|\psi_{w,Z-1}(r_2,\theta_2,\varphi_2)|^2\,d\Omega_1\,d\Omega_2. \tag{10}$$

В этой формуле r_0 уже не содержится. Следовательно, изменение энергии возмущенной системы в первом порядке не зависит от выбора r_0. Правда, отклонение середины указанного промежутка от $-(RhZ^2/1^2+Rh(Z-1)^2/n^2)$, правильное по величине хотя бы приближенно, из формулы (10) не получается. Дело в том, что из-за симметрии $1S$ — орбиты эта величина по формуле (10) оказывается почти равной нулю, и квадратичные члены следующего порядка теории возмущений, соответствующие влиянию так называемой «поляризации», вносят в указанное отклонение больший вклад, чем формула (10). В противоположность этому формула (9) действительно дает первое приближение для расстояния между о- и п-термами.

При численных расчетах величин (6) целесообразно выполнить интегрирование сначала по углам, а потом по радиусам. С помощью функций (8) прежде всего получаем

$$\begin{aligned}
&\iint\left(\frac{e^2}{r_{12}}-\frac{e^2}{r_2}\right)Y_{0,0}^2(\theta_1)Z_{0,0}^2(\varphi_1)\,d\varphi_1\,d\theta_1\sin\theta_1 =\\
&\quad=\iint\left(\frac{e^2}{\sqrt{r_1^2+r_2^2-2r_1r_2\cos(1,2)}}-\frac{e^2}{r_2}\right)\frac{1}{4\pi}\sin\theta_1\,d\theta_1\,d\varphi_1 =\\
&\quad=\frac{e^2}{r_{(1,2)}}-\frac{e^2}{r_2},\quad\text{где}\quad r_{(1,2)}=\begin{cases}r_1 & \text{при } r_1>r_2,\\ r_2 & \text{при } r_2>r_1.\end{cases}
\end{aligned}\tag{11}$$

Интегрирование по углам θ_2, φ_2 дает множитель 1, и остается

$$H^1(vw, vw) = \iint dr_1 r_1^2\, dr_2 r_2^2 X_{1,0;Z}^2(r_1) X_{n,k;Z-1}^2(r_2)\left(\frac{e^2}{r_{(1,2)}} - \frac{e^2}{r_2}\right). \tag{12}$$

Введя сокращенное обозначение $\xi = \frac{2Z}{a} r$, получаем

$$H^{1'}(vw, vw) = \int_0^\infty dr_2 r_2^2 X_{n,k;Z-1}^2(r_2)\frac{1}{2}\int_0^\infty e^{-\xi_1}\xi_1^2\, d\xi_1\left(\frac{e^2}{\xi_{(1,2)}} - \frac{e^2}{\xi_2}\right)\frac{2Z}{a} =$$
$$= -\frac{Ze^2}{a}\int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{e^{-\xi_2}(2+\xi_2)}{\xi_2} X_{n,k;Z-1}^2(r_2). \tag{13}$$

В следующих вычислениях искомые средние значения будут получены точно не для всех n и k; ибо можно легко показать, что для искомых средних значений энергии всегда получаются приближенные формулы типа Ридберга—Ритца. Поэтому достаточно вычислить среднее значение при заданном значении k для двух наименьших значений n ($k+1$ и $k+2$), а для остальных средних значений провести экстраполяцию по формуле Ридберга—Ритца. Приведем здесь формулы, вытекающие из функций (8):

$$\left.\begin{aligned} X_{k+1,k} &= \sqrt{\left(\frac{2Z}{(k+1)a}\right)^3 \frac{1}{(2k+2)!}}\, e^{-\xi/2}\xi^k, && \text{где}\quad \xi = \frac{2Z}{(k+1)a}r;\\ X_{k+2,k} &= \sqrt{\left(\frac{2Z}{(k+2)a}\right)^3 \frac{1}{(2k+2)!(2k+4)}}\, e^{-\xi/2}\xi^k(2k+2-\xi), && \text{где}\quad \xi = \frac{2Z}{(k+2)a}r. \end{aligned}\right\} \tag{14}$$

Учитывая, что в состоянии n, k действует заряд $(Z-1)$, и полагая $\varepsilon = \frac{Z-1}{Zn}$, мы получаем

$$H^{1'}{}_{n=k+1}(vw, vw) = -\frac{Ze^2}{a}\varepsilon^{3+2k}\frac{1}{(2k+2)!}\int_0^\infty d\xi_2 e^{-\xi_2(1+\varepsilon)}\xi_2^{2k}(2+\xi_2) =$$
$$= -2RhZ\frac{(Z-1)^{2k+3}}{(Z(k+2)-1)^{2k+3}}\left(1 + \frac{Z(k+2)-1}{Z(k+1)^2}\right) \tag{15}$$

и

$$H^{1'}{}_{n=k+2}(vw, vw) =$$
$$= -\frac{Ze^2}{a}\varepsilon^{3+2k}\frac{1}{(2k+2)!(2k+4)}\int_0^\infty d\xi_2 e^{-\xi_2(1+\varepsilon)}\xi_2^{2k+1}(2+\xi_2)(2k+2-\xi_2\varepsilon)^2 =$$
$$= -2ZRh\frac{(Z-1)^{2k+3}}{(Z(k+3)-1)^{2k+3}}\frac{4(k+1)(k+2)+(2k+6)\varepsilon^2+2\varepsilon^3}{(1+\varepsilon)^2(2k+4)}. \tag{16}$$

Результаты численного расчета $H^{1'}(vw, vw)/Rh$ даны в таблице 1.

Таблица 1

		$k=1$	$k=2$
$Z=2$	$n=k+1$	$-0{,}0020$	$-6{,}7\cdot 10^{-6}$
	$n=k+2$	$-0{,}00070$	—
$Z=3$	$n=k+1$	$-0{,}0098$	$-5{,}5\cdot 10^{-5}$
	$n=k+2$	$-0{,}0032$	—

Для $k=2$ приведено только по одному среднему значению, так как получаемые по методу Ритца поправки к значению $H^{1'}$ в примененном здесь приближении оказались пренебрежимо малыми. Для значений $k \geqslant 3$ величина $H^{1'}$ не вносит сколько-нибудь заметного вклада в поправку Ридберга. Соответствующие поправки к сдвигу терма δ, определенные формулой

$$E = -\frac{RhZ^2}{1^2} - \frac{Rh(Z-1)^2}{(n+\delta)^2},$$

приведены в таблице 2.

Таблица 2

		$k=1$	$k=2$
$Z=2$	$n=2$	$-0{,}0080$	$-9\cdot 10^{-5}$
	$n=3$	$-0{,}0095$	—
$Z=3$	$n=2$	$-0{,}0098$	$-1{,}9\cdot 10^{-4}$
	$n=3$	$-0{,}0108$	—

Поправка Ритца очень мала по сравнению с полной поправкой.

Переходя теперь к вычислению величины $H^1(vw, wv)$, мы выполним сначала интегрирование по углам. При этом интегрировании H^1 можно заменить на e^2/r_{12}, так как все другие члены зависят только от координат *одного* из электронов и потому не могут давать вклад в компоненту Фурье, отвечающую переходам *двух* электронов.

Итак, если x по величине < 1, то сначала надо рассмотреть интеграл

$$\frac{1}{4\pi}\oint\oint \frac{Y_{km}(\theta_1)Y_{km}(\theta_2)Z_m(\varphi_1)Z_m(\varphi_2)\,d\theta_1 \sin\theta_1\, d\varphi_1\, d\theta_2 \sin\theta_2\, d\varphi_2}{\sqrt{1-2x(\cos\theta_1\cos\theta_2+\sin\theta_1\sin\theta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2))+x^2}}. \tag{17}$$

Этот интеграл с учетом функций (8) сводится к известному при разложении в ряды сферических функций интегралу Пуассона[7)], и его значение равно

$$\frac{x^k}{2k+1}. \tag{18}$$

Вводя снова обозначение $r_{(1,2)}$ для большей, $r_{(2,1)}$ для меньшей из двух величин r_1 и r_2, мы получаем

$$H^1(vw, wv) = \int_0^\infty\int_0^\infty dr_1 r_1^2\, dr_2 r_2^2 \frac{e^2 r_{(2,1)}^k}{r_{(1,2)}^{k+1}} X_{nk}(r_1)X_{10}(r_1)X_{nk}(r_2)X_{10}(r_2). \tag{19}$$

[7)] См., например, *Courant R., Hilbert D.* Methoden der mathematischen Physik. Berlin, 1924, **1**, 423. — Русский перевод: *Курант Р., Гильберт Д.* Методы математической физики. Т. I. М.: Гостехиздат, 1933.

Для частного случая $n = k+1$, полагая снова $\xi = \frac{2Z}{a}r$ и $\varepsilon = \frac{Z-1}{Z(k+1)}$, имеем

$$H_1(vw, wv) = \frac{2e^2Z}{a}\frac{\xi^{2k+3}}{2(2k+2)!}\frac{1}{(2k+1)}\int_0^\infty\int_0^\infty \frac{\xi^k_{(2,1)}}{\xi^{k+1}_{(1,2)}}\xi_1^k e^{-\xi_1(1+\varepsilon)/2}\xi_2^k e^{-\xi_2(1+\varepsilon)/2}\, d\xi_1\xi_1^2\, d\xi_2\xi_2^2 =$$

$$= \frac{e^2Z}{a}\frac{\varepsilon^{2k+3}}{(2k+2)!(2k+1)}\times$$

$$\times\int_0^\infty d\xi_1\xi_1 e^{-\xi_1(1+\varepsilon)/2}\left\{\int_0^{\xi_1} d\xi_2\xi_2^{2k+2}e^{-\xi_2(1+\varepsilon)/2} + \xi_1^{2k+1}\int_{\xi_1}^\infty d\xi_2\xi_2 e^{-\xi_2(1+\varepsilon)/2}\right\}. \quad (20)$$

Выполняя интегрирование $\left(\varepsilon = \frac{Z-1}{(k+1)Z}\right)$, получаем

$$H^1_{n=k+1}(vw, wv) = RhZ\frac{8\varepsilon^{2k+3}}{(1+\varepsilon)^{2k+5}}\frac{2k+5}{2k+1}. \quad (21)$$

Аналогично, для $n = k+2$ $\left(\varepsilon = \frac{Z-1}{Z(k+2)}\right)$ получаем

$$H^1_{n=k+2}(vw, wv) = \frac{e^2Z}{a}\frac{\varepsilon^{2k+3}}{(2k+2)!(2k+4)}\times$$

$$\times\int_0^\infty d\xi_1\,\xi^{2+k}(2k+2-\xi_1\varepsilon)e^{-\xi_1(1+\varepsilon)/2}\int_0^\infty d\xi_2\,\xi_2^{2+k}\frac{\xi^k_{(2,1)}}{\xi^{k+1}_{(1,2)}}(2k+2-\xi_2\varepsilon)e^{-\xi_2(1+\varepsilon)/2}$$

и

$$H^1_{n=k+2}(vw, wv) = ZRh\frac{8\varepsilon^{2k+3}}{(1+\varepsilon)^{2k+5}}\cdot\frac{1}{(2k+4)(2k+1)}\times$$
$$\times\left\{(2k+2)^2(2k+5) - 2\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon}(2k+2)\left(4k^2+20k+25\right) + \right.$$
$$\left. + \left(\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon}\right)^2(2k+3)\left(4k^2+26k+44\right)\right\}. \quad (22)$$

Из этих расчетов прежде всего следует, что значение $H^1(vw, wv)$ всегда положительно. В соответствии с выводами цитированной статьи это означает, что п-система, т.е. та система, которая содержит состояния с эквивалентными электронами, всегда имеет более высоко расположенные термы.

Численные значения $H^1(vw, wv)/Rh$ приведены в таблице 3.

Таблица 3

		$k=1$	k=2	$k=3$
$Z=2$	$n=k+1$	0,00765	0,0000257	$5{,}25\cdot10^{-8}$
	$n=k+2$	0,00246	0,0000150	$4{,}31\cdot10^{-8}$
$Z=3$	$n=k+1$	0,0307	0,000189	$6{,}95\cdot10^{-7}$
	$n=k+2$	0,00935	0,000108	$5{,}72\cdot10^{-7}$

Разность между орто- и паратермом, как показано в цитированной статье, в этом приближении равна $2H^1(vw, wv)$.

Приведенные выше численные данные были использованы при вычислении разности поправок Ридберга—Ритца к пара- и ортотермам по формуле $\frac{n^3}{(Z-1)^2}\frac{H^1(vw,wv)}{Rh} = \Delta\delta$, и вычисленные значения были сопоставлены с опытными. Эмпирические значения для расстояния между орто- и паралития взяты мной из измерений С. Вернера[8].

Таблица 4

		$\Delta\delta$ для					
		$2p$–$2P$	$3p$–$3P$	$3d$–$3D$	$4d$–$4D$	$4f$—$4F$	$5f$–$5F$
He	выч.	0,061	0,067	0,00069	0,00096	$3{,}4\cdot10^{-6}$	$5{,}4\cdot10^{-6}$
	изм.	0,75	0,079	0,00044	0,00063	—	—
Li^+	выч.	0,061	0,063	0,0013	0,0017	$1{,}1\cdot10^{-5}$	$1{,}8\cdot10^{-5}$
	изм.	0,067	0,069	0,0010	0,0014	—	—

Для P-термов формулы (21)–(22), как и следовало ожидать, не дают достаточно точных результатов. Для D-термов плохое согласие можно объяснить частично тем, что здесь речь идет о величинах, лежащих на грани точности измерений; однако и теоретическое значение может претерпевать существенные изменения при учете квадратичных членов, т. е. во втором приближении теории возмущений. Проведенные здесь расчеты носят лишь оценочный характер. Качественно же, функциональная зависимость поправки Ридберга—Ритца от квантовых чисел воспроизводится теорией довольно неплохо.

§3

Для того, чтобы вычислить наряду с относительным расстоянием между о- и п-системой также и абсолютное положение термов, например по отношению к водородным термам, следует перейти ко второму приближению в энергии возмущения. Однако точные расчеты второго приближения были бы очень утомительными, и потому я ограничусь и здесь грубой оценкой членов второго порядка. Для больших значений k из наглядных соображений совершенно очевидно, что наибольший вклад в члены второго порядка вносит так называемая «поляризация» внутренней области атома. Наряду с поляризационными имеются и другие соответствующие высшим индуцированным мультиполям (квадрополям и т. д.) члены, которые оказывают заметное влияние как на абсолютное положение термов, так и на относительное расположение о- и п-систем термов. Индуцированный же диполь не влияет на *относительное* расположение двух систем термов. Таким образом, поляризационный член (после прибавления приведенных в таблицах 1 и 2 членов первого порядка) прямо дает приблизительное расстояние от середины промежутка между термами о- и п-системы до соответствующего водородного терма. Для больших значений k поляризационный член можно взять из расчетов цитированной выше работы И. Валлера[9]. Однако для малых значений k, как заметил Валлер, его расчеты не дают хорошего приближения к искомой величине. Этому также можно дать наглядное объяснение, Валлер вычисляет поляризующее действие *однородного* электрического поля на внутреннюю область атома. Пока индуцирующий электрон находится далеко

[8] С. Вернер любезно сообщил мне результаты этих измерений до публикации. См. также работу *Schüler N.* Zs. Phys., 1926, **37**, 568. Спектр ортолития$^+$ был указан в работах: Ann. Phys., 1925, **76**, 292; *Werner S.* Nature, Febr. 1924; Okt. 1925.

[9] *Waller I.* Op. cit.

от ядра, электрическое поле, создаваемое им во внутренней области атома, можно считать однородным. Но как только его расстояние от ядра по порядку величины сравнивается с аналогичным расстоянием внутреннего электрона, приближение однородного поля становится неверным, индуцированный диполь оказывается существенно *меньше* вычисленного в предположении однородного поля. Если провести детальное исследование этого уменьшения поляризуемости с уменьшением k, то при использовании членов второго порядка получается результат, что уже для термов d, D, f, F и т. д. значения Валлера дают очень хорошее приближение, но что для P-термов поляризационный член составляет в действительности примерно только одну треть значения, вычисленного Валлером. Я не буду здесь приводить расчеты, ведущие к этому результату. Итак, для вклада поляризационных членов в поправку Ридберга—Ритца мы возьмем значения из цитированной в примечании 6 работы Валлера (значения для P-термов поделены здесь на 3):

	P	D	F
He	$\sim -0{,}018$	$-0{,}0025$	$-0{,}00043$
Li^+	$\sim -0{,}014$	$-0{,}0021$	$-0{,}00034$

Прибавим теперь к ним вклад первого порядка от членов $H^{1'}(v\omega, v\omega)$ и сравним с измеренной поправкой Ридберга к середине промежутка между орто- и паратермом.

Таблица 5

		P	D	F
He	выч.	$\sim -0{,}028$	$-0{,}0026$	$-0{,}00043$
	изм.	$-0{,}029$	$-0{,}0025$	—
Li^+	выч.	$\sim -0{,}025$	$-0{,}0023$	$-0{,}00034$
	изм.	$-0{,}020$	$-0{,}0022$	$0{,}0002$

Точность наших оценочных теоретических значений для P-термов на самом деле значительно меньше, чем могло бы показаться при хорошем согласии между теорией и опытом.

Проделанные выше расчеты позволили нам получить общее представление о расположении термов искомого спектра. При этих оценках S-термы, а также термы, соответствующие возбужденным состояниям двух электронов, должны исключаться из рассмотрения. Как показывают вычисления, проделанные в цитированной статье, вероятности перехода в случае рассмотренной в первой части этой работы модели атома из точечных зарядов обращаются в нуль для перекрестных комбинаций между о- и п-системами; внутри каждой отдельной системы вероятности перехода (исключая переходы в $1S$-терм!) отличаются от вероятностей перехода в водороде примерно на разницу между энергией рассматриваемых стационарных состояний и энергией соответствующих состояний водорода. Поэтому рассмотрение атома, состоящего из точечных зарядов, мы на этом пока заканчиваем и переходим к обсуждению модели атома с магнитными моментами и тонкой структуры.

II

СПЕКТР С УЧЕТОМ ЭЛЕКТРОННЫХ МАГНИТНЫХ МОМЕНТОВ

§1

Для первого приближения мы рассмотрим следующую задачу. Пусть центр тяжести двух электронов жестко закреплен, но вращательные моменты электронов $\mathfrak{s}_1$, $\mathfrak{s}_2$

(«квантовое число» $s_1 = s_2 = 1/2$) по направлению не определены. Между каждым из двух электронных магнитных моментов и какой-нибудь фиксированной внешней силой $\mathfrak{K}$ пусть существует взаимодействие, описываемое членом $H_1(\mathfrak{K}, \mathfrak{s})$ в гамильтоновой функции. Далее, взаимодействие между двумя магнитными моментами пусть задается членом $H_2(\mathfrak{s}_1, \mathfrak{s}_2)$. Существенно, что оба электронных магнитных момента ведут себя во всех отношениях одинаково. Решение этой задачи по прежней квантовой теории выглядело бы, очевидно, так: оба электронных магнитных момента устанавливаются *параллельно* или *антипараллельно* — *независимо* от соотношения между порядками величин H_1 и H_2, поскольку внешняя сила оказывает на оба магнита *одинаковое* влияние, — ориентация всей системы во внешнем поле $\mathfrak{K}$ вследствие равенства $|\mathfrak{s}_1| = |\mathfrak{s}_2| = \frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$ приводит к появлению «триплета» и «синглета».

Квантовомеханическое рассмотрение дает совершенно аналогичный результат. Проекция $\mathfrak{s}_1$, $\mathfrak{s}_2$ на направление внешней силы $\mathfrak{K}$ мы будем обозначать через m_1 и m_2. Величину $m_1 + m_2 = m$ снова можно заранее считать *диагональной матрицей*. Таким образом, в невозмущенной системе имеются четыре состояния, которые мы наделим номерами a, b, c, d.

m_1	m_2	m	
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	a
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0	b
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	c
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	d

Очевидно, вследствие квантования m состояния a и d существуют уже в невозмущенной системе и имеют энергию $H_1(aa)+H_2(aa)$ и соответственно $H_1(dd)+H_2(dd)$, причем $H_2(aa) = H_2(dd)$. Для состояний же b и c существует *резонансное вырождение*, описанное в цитированной статье. С этой точки зрения состояния a и d имеют *эквивалентные* подсистемы. Поэтому же они комбинируют только с *одним* из двух решений резонансной задачи bc, и разбиение четырех состояний на две системы из одного и трех состояний здесь совершенно аналогично разбиению на о- и п-систему в части 1. Энергия состояний «b, c» *возмущенной* системы, в соответствии с уравнением (12) цитированной статьи (при этом следует учитывать, что $H_1(bc{=}0)$, имеет вид:

для «b»:

$$H_1(bb) + H_2(bb) + H_2(bc)$$

и для «c»:

$$H_1(bb) + H_2(bb) - H_2(bc). \tag{23}$$

Для совпадения резонансного разбиения с разбиением на «мультиплеты» (синглет—триплет) существенно то обстоятельство, что для электронов $s = 1/2$.

Если мы снова обратимся, в соответствии с уравнениями (16) цитированной статьи, к шредингеровским собственным функциям этой задачи, то собственные функции «триплетных» состояний a, b, d будут *симметричными* по координатам двух электронов с магнитными моментами, а собственная функция «синглетного» состояния c при перестановке электронов будут изменять знак и мы будем называть ее «антисимметричной».

Эти рассуждения принципиально ни в чем не изменятся, когда мы перейдем к собственно интересующей нас задаче об атоме гелия с магнитными электронами. Пока энергии взаимодействия H_1 и H_2 остаются существенно меньшими, чем энергии и разности энергий для рассмотренной в части 1 модели, результаты только что проделанных вычислений можно прямо рассматривать как решение уравнения

вековых движений возмущенной системы, причем в качестве невозмущенной системы следует брать здесь каждое из всех состояний модели части 1. Только векторы (параллельные и антипараллельные) $\mathfrak{s}_1$ и $\mathfrak{s}_2$ ориентируются не по внешней силе $\mathfrak{K}$, а по результирующему моменту импульса, получаемому при сложении с модельным моментом импульса части 1 по обычному правилу структуры.

Таким образом, причина, по которой векторы $\mathfrak{s}_1$ и $\mathfrak{s}_2$ устанавливаются параллельно или антипараллельно, как это требуется обычным правилом структуры, заключается *не* в сильном взаимодействии между $\mathfrak{s}_1$ и $\mathfrak{s}_2$, а в том, что на оба магнитных момента действует совершенно одинаковая сила; ибо оба электрона в рассмотренной в части 1 модели с течением времени совершают в точности одинаковые движения (с разными фазами).

Разбиение полной системы термов на две подсистемы, не комбинирующие между собой, также не доставляет теперь затруднений. Шредингеровская собственная функция некоторого состояния всего атома равна произведению собственных функций модели части 1 и только что рассмотренной «синглетно—триплетной модели». Поскольку собственные функции о-системы были антисимметричными, а собственные функции п-системы симметричными, то собственные функции *всего атома* будут:

симметричными для триплетов п-системы и синглетов о-системы;
антисимметричными для синглетов п-системы и триплетов о-системы.

Тем самым и определяется разбиение на не комбинирующие между собой системы термов; в частности, если мы возьмем ту подсистему, которая не содержит эквивалентных орбит, то паратермами будут синглеты, а ортотермами—триплеты. Это разбиение на некомбинирующие подсистемы (см. цит. статью) сохраняется и тогда, когда исходная предпосылка указанных выше вычислений больше не выполняется, т.е. если, например, расстояние о–п не будет велико по сравнению с значениями H_1 и H_2. Однако в этом случае простого разбиения спектра на синглеты и триплеты уже не существует.

Это поведение имеет большое сходство с поведением атома без резонанса, но с взаимодействием между электронными магнитными моментами, порядок величины которого определяется расстоянием между синглетом и триплетом, и потому вполне понятно, что характерные структурные особенности в большей части могут быть сведены к этой последней модели.

В свою очередь, обсуждаемая здесь двухэлектронная модель также воспроизводит все более тонкие черты в структуре спектров, например, щелочноземельных металлов. Для триплетов всегда будет действовать известный «закон косинуса», если магнитное взаимодействие между ядром и электронами будет больше, чем взаимодействие двух электронных магнитных моментов между собой. Во внешнем магнитном поле триплеты ведут себя так, как в обычно обсуждаемых при выводе эффекта Зеемана моделях.

§2

Можно задать вопрос, почему именно He и Li^+ выпадают из ряда щелочноземельных металлов в том отношении, что тонкая структура у них не соответствует обычной триплетной схеме. Причину этого следует искать в сравнительно сильном взаимодействии электронных магнитных моментов между собой [10]. Для более детального исследования тонкой структуры He и Li^+ мы напишем магнитную

[10] За указание на это, а также за многие ценные предложения в совместных обсуждениях я благодарен Н. Бору.

часть гамильтоновой функции всей модели в приближении, обычном в случае водорода ($\mathfrak{r}_1, \mathfrak{v}_1$ и $\mathfrak{r}_2, \mathfrak{v}_2$ означает радиус-вектор и скорость электронов):

$$\begin{aligned}\Delta H = &\frac{e^2 Z}{mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_1\mathfrak{v}_1]}{r_1^3}\mathfrak{s}_1 - \frac{e^2}{mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_2, \mathfrak{v}_1-\mathfrak{v}_3]}{r_{12}^3}\mathfrak{s}_1 + \\ &+\frac{e^2 Z}{mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_2\mathfrak{v}_2]}{r_2^3}\mathfrak{s}_2 - \frac{e^2}{mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_2-\mathfrak{r}_1, \mathfrak{v}_2-\mathfrak{v}_1]}{r_{12}^3}\mathfrak{s}_2 - \\ &-\frac{e^2 Z}{2mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_1\mathfrak{v}_1]}{r_1^3}\mathfrak{s}_1 + \frac{e^2}{2mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_1-\mathfrak{r}_2, \mathfrak{v}_1]}{r_{12}^3}\mathfrak{s}_1 - \\ &-\frac{e^2 Z}{2mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_2\mathfrak{v}_2]}{r_2^3}\mathfrak{s}_2 + \frac{e^2}{2mc^2}\frac{[\mathfrak{r}_2-\mathfrak{r}_1, \mathfrak{v}_2]}{r_{12}^3}\mathfrak{s}_2 + \\ &+\frac{e^2}{m^2c^2}\frac{-3(\mathfrak{s}_1, \mathfrak{r}_2-\mathfrak{r}_1)(\mathfrak{s}_2, \mathfrak{r}_2-\mathfrak{r}_1) + (\mathfrak{s}_1, \mathfrak{s}_2)r_{12}^2}{r_{12}^5}.\end{aligned} \quad (24)$$

Первая и вторая строки соответствуют магнитному взаимодействию в системе отсчета, в которой один из электронов покоится. Третья и четвертая строки дают члены, возникающие по Томасу[11] при преобразованиях Лоренца (которые здесь прямо применять нельзя, так как нас интересует только среднее по времени значение (24)). Пятая строка описывает взаимодействие двух магнитных моментов. Теперь необходимо образовать среднее значение (24) по невозмущенному движению

$$\Delta\bar{H} = \int\ldots\int d\Omega_1\, d\Omega_2 \frac{1}{2}\Big(\varphi_1(v)\varphi_2(w) - \varphi_1(w)\varphi_2(v)\Big)^2 \Delta H.$$

Это среднее значение снова расщепляется на две пары членов типа (9а) и (9б). Последняя пара членов соответствует резонансному взаимодействию и по величине составляет лишь дробную часть первых двух членов. Для грубой оценки мы удовлетворимся вычислением первых двух членов, так как вторая пара представляется довольно сложной и для численных расчетов. В первых двух членах следует сначала найти среднее значение для 1-го электрона на $1S$-орбите, для 2-го электрона на орбите n, k, затем необходимо произвести перестановку электронов и взять арифметическое среднее двух значений. В этом приближении можно осреднять *меньший* радиус, например, $\mathfrak{r}_1$ по сравнению с $\mathfrak{r}_2$ или наоборот. Усредняя далее пятую строку (24) сначала по классической теории «k-прецессии» внешнего электрона, мы можем заменить

$$\overline{\frac{-3(\mathfrak{s}_1, \mathfrak{r}_1)(\mathfrak{s}_2, \mathfrak{r}_1) + (\mathfrak{s}_1, \mathfrak{s}_2)r_1^2}{r_1^5}} \quad \text{на} \quad \overline{\frac{\frac{3}{2}(\mathfrak{s}_1, \bar{\mathfrak{k}}_1)(\mathfrak{s}_2, \bar{\mathfrak{k}}_1) - \frac{1}{2}(\mathfrak{s}_1, \mathfrak{s}_2)}{r_1^3}}$$

(аналогично с $\mathfrak{k}_2$), где $\bar{\mathfrak{k}}_1$ или $\bar{\mathfrak{k}}_2$ означает единичный вектор в направлении $\mathfrak{k}_1$ или $\mathfrak{k}_2$. Мы предположим, что квантовомеханическое усреднение даст такой же результат. Тогда из (24) с учетом $k_{1S} = 0$ получается:

$$\Delta H = \frac{e^2}{2m^2c^2}\left(\frac{1}{r^3}\right)_{n,k}\left\{(Z-3)\mathfrak{k}\frac{\mathfrak{s}_1+\mathfrak{s}_2}{2} + 3|\mathfrak{s}_1|\cos(\mathfrak{s}_1\mathfrak{k})|\mathfrak{s}_2|\cos(\mathfrak{s}_2\mathfrak{k}) - (\mathfrak{s}_1\mathfrak{s}_2)\right\}. \quad (25)$$

[11] *Thomas L. H.* Nature, 1926, **117**, 514.

Последний член скобок не участвует в тонкой структуре внутри триплета, так как он зависит только от относительного расположения $\mathfrak{s}_1$ и $\mathfrak{s}_2$.

Для вычисления второго члена скобок мы заметим, что по классической механике

$$|\mathfrak{s}_1| \cos(\mathfrak{s}_1\mathfrak{k}) = |\mathfrak{s}_1|\{\cos(\mathfrak{k}\mathfrak{s})\cos(\mathfrak{s}_1\mathfrak{s}) - \sin(\mathfrak{k}\mathfrak{s})\sin(\mathfrak{s}_1\mathfrak{s})\cos\psi\}, \tag{26}$$

где $\mathfrak{s} = \mathfrak{s}_1 + \mathfrak{s}_2$ и ψ — канонически сопряженная с $\mathfrak{s}$ угловая переменная[12]. Аналогично

$$|\mathfrak{s}_2| \cos(\mathfrak{s}_2\mathfrak{k}) = |\mathfrak{s}_2|\{\cos(\mathfrak{k}\mathfrak{s})\cos(\mathfrak{s}_2\mathfrak{s}) + \sin(\mathfrak{k}\mathfrak{s})\sin(\mathfrak{s}_2\mathfrak{s})\cos\psi\}. \tag{27}$$

Следовательно,

$$\overline{|\mathfrak{s}_1|\cos(\mathfrak{s}_1\mathfrak{k})|\mathfrak{s}_2|\cos(\mathfrak{s}_2\mathfrak{k})}|\mathfrak{s}_1||\mathfrak{s}_2|\left\{\cos^2(\mathfrak{k}\mathfrak{s})\cos(\mathfrak{s}_1\mathfrak{s})\cos(\mathfrak{s}_2\mathfrak{s}) - \frac{1}{2}\sin^2(\mathfrak{k}\mathfrak{s})\sin(\mathfrak{s}_1\mathfrak{s})\sin(\mathfrak{s}_2\mathfrak{s})\right\}. \tag{28}$$

Применяя формулу Кронига[13], мы можем перенести этот расчет в квантовую механику.

Для этого проще всего, принимая во внимание нормировку, отождествить наши векторы $\mathfrak{s}_1$, $\mathfrak{s}_2$ с векторами Кронига K_1 и K_0, наш вектор $\mathfrak{s}$ с вектором L Кронига, наш $\mathfrak{k}$ с J (!) Кронига, наше число j с числом R Кронига. Тогда естественное обобщение таблицы 2 Кронига[14] дает искомые средние значения. Для $s_1 = s_2 = 1/2$, $s = 1$ получается следующий результат

$$\overline{|\mathfrak{s}_1|\cos(\mathfrak{s}_1\mathfrak{k})|\mathfrak{s}_2|\cos(\mathfrak{s}_2\mathfrak{k})} = \frac{h^2}{2\pi}\left\{\frac{[j(j+1) - k(k+1) - s(s+1)]^2}{16k(k+1)} - \right.$$
$$\left. - \frac{\left[-(k+\frac{1}{2})^2 + (j+s+\frac{1}{2})^2\right]\left[(k+\frac{1}{2})^2 - (j-s+\frac{1}{2})^2\right]}{16k(k+1)}\right\}. \tag{29}$$

Отсюда снова для $s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$, $s = 1$ имеем

$$\Delta H = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \frac{e^2}{2m^2c^2}\left(\overline{\frac{1}{r^3}}\right)_{n,k}\left\{\frac{Z-3}{4}[j(j+1) - k(k+1) - 2] + \right.$$
$$\left. + 3\frac{[j(j+1)-k(k+1)-2]^2}{16k(k+1)} - \frac{\left[(j+\frac{3}{2})^2 - (k+\frac{1}{2})^2\right]\left[(k+\frac{1}{2})^2 - (j-\frac{1}{2})^2\right]}{16k(k+1)} - \frac{1}{4}\right\}. \tag{30}$$

Поскольку тонкая структура достаточно хорошо известна только для терма $2p$, мы, полагая $k = 1$, $j = 2, 1, 0$, получаем

$$\Delta H_{2p} = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \frac{e^2}{2m^2c^2}\left(\overline{\frac{1}{r^3}}\right)_{2p}\left\{(Z-3)\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1\right) + \left(\frac{3}{8}, -\frac{3}{8}, \frac{3}{2}\right) - \frac{1}{4}\right\}. \tag{31}$$

[12] См., например, *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1924, **26**, 291. — Русский перевод: с. 72–85.

[13] *Kroning R. de L.* Zs. Phys., 1925, **33**, 261. Доказательство этих формул на основе квантовой механики было дано в работе *Dirac P.* Proc. Roy. Soc. London, 1926, **111**, 281.

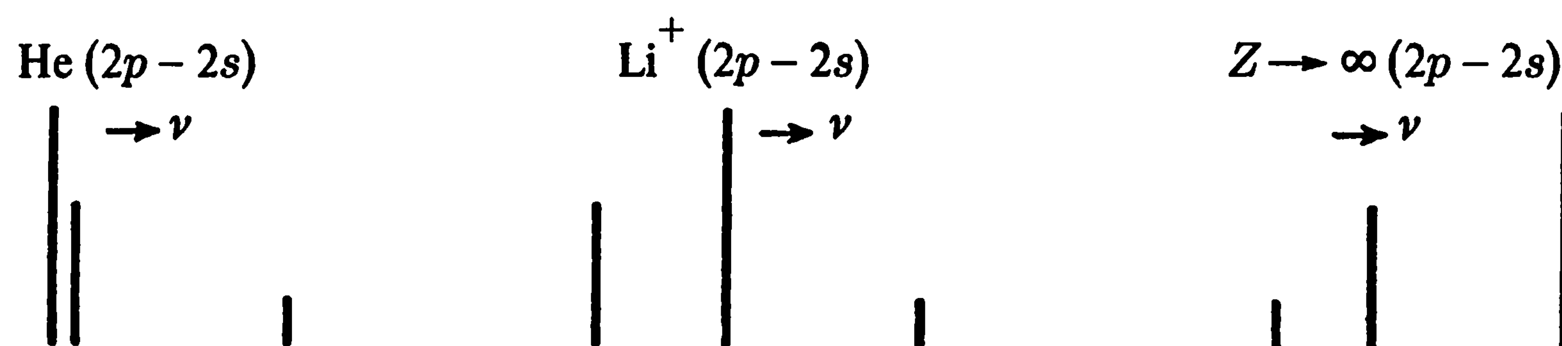
[14] *Kroning R. de L.* Zs. Phys., 1925, **33**, 265.

Для частных случаев имеем

$$Z=2: \quad \Delta H_{2p} = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \frac{e^2}{2m^2c^2} \left(\overline{\frac{1}{r^3}}\right)_{2p} \left(-\frac{3}{8}, -\frac{1}{8}, \frac{9}{4}\right);$$

$$Z=3: \quad \Delta H_{2p} = \left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \frac{e^2}{2m^2c^2} \left(\overline{\frac{1}{r^3}}\right)_{2p} \left(\frac{1}{8}, -\frac{5}{8}, \frac{5}{4}\right).$$

Из формулы (31) следует прежде всего: для больших значений Z действует, как и следовало ожидать, «закон косинуса». Для малых же значений Z преобладают другие члены. Учитывая известные соотношения для интенсивности $2p$-триплета $5:3:1$, мы получаем следующую картину расщепления, например, для $2p$–$2s$[15]:



Если для начала отвлечься от абсолютных величин, рисунок слева довольно хорошо воспроизводит эмпирическую тонкую структуру для He. При измерении две сильных линии слева сливаются в одну и дают вместе с правой компонентой дублет ортогелия с хорошо известной аномалией в интенсивностях. Второй рисунок также удовлетворительно согласуется с эмпирической тонкой структурой линии 5485 для Li^+ по Шюлеру[16], если привлечь к сравнению общий характер картины расщепления. Однако Шюлер указал еще ряд других компонент этой линии. К этому можно добавить, что Макленнан и Энсли[17] также наблюдали более сложную, чем в обычных дублетных линиях, тонкую структуру красной линии в дуговом спектре лития. Можно ли приписать эту особую тонкую структуру, как предполагает Макленнан, изотопическим эффектам — представляется довольно сомнительным. Прежде всего следует подумать, как указал Шюлер, об истинной ядерной структуре. Действительно, магнитный момент ядра такого же порядка величины, как момент электрона, давал бы эффект соответственного порядка. Но во всяком случае можно предполагать, что в модели, положенной в основу нашей теории, никакая особая тонкая структура не должна появляться.

Расчет абсолютной величины указанной выше тонкой структуры связан с определением величины $\overline{(1/r^3)}_{2p}$. Хотя сам $2p$-терм мало отличается от соответствующего терма водорода, это отличие может стать очень заметным при усреднении $1/r$ в третьей степени, ведь для $k=0$ получается $\overline{1/r^3}=\infty$. Поэтому значение $\overline{1/r^3}$, взятое из водородоподобных атомов, будет заведомо давать очень плохое приближение. С другой стороны, точное вычисление величины $\overline{1/r^3}$ было бы очень сложным. Поэтому для временной оценки мы все-таки возьмем значения, соответствующие

[15] На возможность рассматривать гелиевый дублет как искаженный триплет было указано еще в работе *Slater T. S.* Proc. Nat. Acad. Amer., 1925, **11**, 732. См., в частности, также измерения интенсивности в работах *Ornstein L. S., Burger H. C.* Zs. Phys., 1924, **26**, 57; *Burger D.* Zs. Phys., 1926, **38**, 437.

[16] *Schüler N.* Zs. Phys., 1926, **37**, 568.

[17] *MacLennan T. C., Ainslie D. S.* Proc. Roy. Soc. London, 1922, **101**, 342.

водородоподобному атому — при этом мы ожидаем, что полученные таким способом теоретические значения будут сильно преуменьшены — и сравним расстояния между крайними компонентами с измерениями.

Для водородоподобных спектров имеем

$$\left(\frac{1}{r^3}\right)_{2p} = Rh\alpha^2\frac{Z^3}{24} \tag{32}$$

(α — постоянная тонкой структуры Зоммерфельда).

Расстояние между крайними компонентами тонкой структуры, таким образом, будет для

$$\text{He}: \quad \text{Rh}\alpha^2\frac{(Z-1)^3}{24}\,\frac{21}{8} = 0{,}62\ \text{см}^{-1};\ \text{наблюдаемое}\ 1{,}07\ \text{см}^{-1},$$

$$\text{Li}^+: \quad \text{Rh}\alpha^2\frac{(Z-1)^3}{24}\,\frac{15}{8} = 3{,}65\ \text{см}^{-1};\ \text{наблюдаемое}\ 4{,}4\ \text{см}^{-1},$$

Расхождение можно объяснить частично тем, что при усреднении энергии (24) не были учтены резонансные члены.

Проведенные здесь вычисления должны были показать, что квантовая механика позволяет, во-первых, дать качественное описание спектра вплоть до очень тонких деталей также для атомов с двумя электронами, и, во-вторых, определить приближенно функциональную зависимость термов от квантовых чисел. Это рассмотрение настоятельно требует еще дополнения в двух направлениях. До сих пор отсутствует ясное обоснование для выбора системы термов, не содержащей состояний с эквивалентными орбитами электронов. Можно надеяться, что при попытке устранить этот недостаток мы встретимся с более глубокими взаимосвязями. Другой пробел проведенного здесь рассмотрения заключается в недостаточной точности. Следует требовать, чтобы теоретические значения термов были вычислены с такой точностью, чтобы согласие их с экспериментальными значениями могло быть проведено до последнего десятичного знака после запятой. Таким образом, методы квантовомеханической теории возмущений должны совершенствоваться все более и более, пока мы не разработаем метод, который, подобно методу в астрономии, позволит проводить действительно количественное определение искомых постоянных без слишком большой вычислительной работы.

Копенгаген, Институт теоретической физики,
июль 1926 г.

К ПРИНЦИПУ ЗАПРЕТА ПАУЛИ*

Согласно принципу запрета Паули между уровнями энергии атомной системы с n электронами и уровнями энергии системы, в которой n электронов принадлежат одной замкнутой оболочке, имеется далеко идущая аналогия. В основе ее лежит допущение о существовании замкнутой оболочки. В свою очередь такое допущение предполагает, что, если пренебречь взаимодействием между электронами, то один электрон может занимать лишь конечное число соседних уровней, находящихся на большом (даже по сравнению с энергией взаимодействия) расстоянии от других уровней энергии системы. Эквивалентность системы n электронов системе n «дырок», как показал Паули [1)], полна прежде всего в отношении *числа* уровней энергии. Что же касается *величины* уровней, то вопрос о том, сколь далеко прослеживается здесь эквивалентность, пока не исследован. Если N — число электронов в замкнутой оболочке, то, как будет показано в этой работе, уравнение Шредингера для n электронов можно заменить совершенно аналогичным по структуре, эквивалентным уравнением Шредингера для $N-n$ дырок. Если взаимодействие электронов имело вид e^2/r_{lm}, то взаимодействие дырок чисто формально также можно представить в виде e^2/r_{lm}. Впрочем, эта эквивалентность остается в силе лишь до тех пор, пока возмущения, связанные с возможными переходами в возбужденные состояния (то есть в состояния, лежащие вне замкнутой оболочки), пренебрежимо малы: эквивалентность имеет место лишь в так называемом «первом приближении» метода возмущения, в котором взаимодействие рассматривается как возмущение.

§1

Пусть

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - eV - E\right)u = 0 \qquad (1)$$

— уравнение Шредингера для отдельно взятого электрона в невозмущенной системе, и $E_1, E_2, \ldots, E_N$ — соседние уровни энергии с собственными функциями $u_1, u_2, \ldots, u_N$. Возмущение состоит из парного взаимодействия H^{lm} любых двух электронов (например, $H^{lm} = e^2/r_{lm}$) и из действующего на каждый электрон внешнего возмущения H^l. Таким образом, волновое уравнение всей системы в целом представимо в виде

$$\left\{\sum_{l=1}^{m}\left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta^l - eV^l + H^l\right) + \sum_{l>m}^{n} H^{lm} - E\right\}\psi = 0. \qquad (2)$$

* Zum Paulischen Ausschliessungsprinzip. — Ann. Phys., 1931, **10**, 888–904. *Перевод Ю. А. Данилова.*

1) *Pauli W.* Zs. Phys., 1925, **31**, 373–385. — Русский перевод в кн.: *Паули В.* Труды по квантовой теории. М.: Наука, 1975. Т. 1. С. 634–644.

18*

Собственную функцию $\psi(r_1, r_2, \ldots, r_n)$ возмущенной системы можно разложить по собственным функциям невозмущенной системы, представимых в виде произведений решений уравнения (1). Коэффициенты S_k такого разложения зависят от квантовых чисел отдельных электронов и удовлетворяют соотношению

$$\sum_k E_{ik} S_k - W S_i = 0. \tag{2a}$$

Индекс k нумерует квантовые состояния всех электронов, E_{ik} — матричные элементы оператора энергии по невозмущенным собственным функциям. Как показали Иордан, Клейн и Вигнер[2)], вместо квантовых чисел электронов в качестве переменной можно выбрать *число электронов* N_k в k—hbox-м стационарном состоянии ($N_k = 0,\ 1$). Итак, требуется найти шредингеровскую функцию, которая зависит только от чисел N_k. Чтобы записать соответствующее уравнение Шредингера, положим по определению

$$N_i = a_i^* a_i, \tag{3}$$

где a_i допускают наглядную интерпретацию: это — некоммутирующие амплитуды трехмерных волновых функций. В случае статистики Ферми выполняются коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} a_i^* a_k + a_k a_i^* &= \delta_{ik}, \\ a_i a_k + a_k a_i &= 0, \\ a_i^* a_k^* + a_k^* a_i^* &= 0. \end{aligned} \tag{4}$$

Эти коммутационные соотношения выполняются, если положить

$$a_i^* = N_i \Delta_i \nu_i, \quad a_i = \nu_i \Delta_i N_i. \tag{5}$$

Здесь Δ_i обозначает оператор, переводящий N_i в $1 - N_i$, а ν_i — функция, принимающая значения $+1$ и -1, которая удовлетворяет соотношению

$$\nu_i = \prod_{k \leqslant i} (1 - 2N_i). \tag{5a}$$

Чтобы записать уравнение Шредингера в переменных N_i, необходимо еще выразить оператор энергии (2) или (2a) через амплитуды a_i. Следуя Иордану и Вигнеру, получаем:

$$E = \sum_{i,k} a_i^* a_k (\delta_{ik} E_i + H_{ik}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k,r,s} a_i^* a_k^* a_r a_s H_{ik,rs}. \tag{6}$$

Матричные элементы H_{ik} и $H_{ik,rs}$ имеют здесь следующий смысл:

$$\begin{aligned} H_{ik} &= \int u_i^*(l) H^l u_k(l)\, d\tau_l, \\ H_{ik,rs} &= \int u_i^*(l) u_k^*(m) H^{lm} u_r(m) u_s(l)\, d\tau_l\, d\tau_m, \end{aligned} \tag{7}$$

E_i — значения энергии невозмущенных состояний.

[2)] *Jordan P., Klein O.* Zs. Phys., 1927, **45**, 751; *Jordan P., Wigner E.* Zs. Phys., 1928, **47**, 631.

Если суммы в соотношении (6) взять по *всем* состояниям невозмущенной системы, то соотношение (6) математически полностью эквивалентно уравнению (2). Если же эти суммы берутся только по состояниям $1, 2, \ldots, N$, входящим в рассматриваемую группу уровней энергии, то соотношение (6) представляет собой задачу на собственные значения для рассматриваемой группы уровней. Решение ее дает первое приближение к решению уравнения (2). Эту задачу на собственные значения можно преобразовать в эквивалентную задачу на собственные значения для дырок. Действительно, оператор энергии в задаче на собственные значения для электронов имеет вид

$$E = \sum_{i,k}^{N} a_i^* a_k (\delta_{ik} E_i + H_{ik}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k,r,s} a_i^* a_k^* a_r a_s H_{ik,rs}. \qquad (6a)$$

Соотношение (6а) нетрудно преобразовать в эквивалентное соотношение, в котором в качестве переменных будут выступать величины, характеризующие не электроны, а дырки. Прежде всего введем величину

$$N_i' = 1 - N_i, \qquad (8)$$

означающую, как нетрудно видеть, «число дырок в состоянии i» (N_i' может принимать значения 0 и 1). Затем по аналогии с соотношениями (4) и (5) определим оператор

$$\Delta_i' = \Delta_i \qquad (9)$$

и функцию

$$\nu_i' = \prod_{k \leqslant i} (1 - 2N_k') = (-1)^i \nu_i. \qquad (10)$$

Тогда амплитуды a_i' будут удовлетворять соотношениям

$$a_i'^* = N_i' \Delta_i' \nu_i' (-1)^{i+1}, \quad a_i' = \nu_i' \Delta_i' N_i' (-1)^{i+1},$$

несколько отличным от соотношений (5), но коммутационные соотношения (4) остаются неизменными и для амплитуд a_i':

$$\begin{aligned} a_i'^* a_k' + a_k' a_i'^* &= \delta_{ik}, \\ a_i' a_k' + a_k' a_i' &= 0, \\ a_i'^* a_k'^* + a_k'^* a_i'^* &= 0. \end{aligned} \qquad (11)$$

Из соотношений (8)–(11) получаем

$$a_i = \nu_i \Delta_i N_i = \nu_i \Delta_i (1 - N_i') = \nu_i N_i' \Delta_i' = (-1)^{i+1} N_i' \Delta_i' \nu_i' = a_i'^*, \qquad (12)$$

а также

$$a_i^* = a_i'. \qquad (13)$$

Оператор энергии (6а) можно также преобразовать к виду

$$E = \sum_{i,k}^{N} a_i' a_k'^* (\delta_{ik} E_i + H_{ik}) + \frac{1}{2} \sum_{i,k,r,s}^{N} a_i' a_k' a_r'^* a_s'^* H_{ik,rs}. \qquad (14)$$

Переставляя множители так, чтобы все $a_i'^*$ оказались слева, получаем

$$E = \sum_i^N (H_{ii} + E_i) + \frac{1}{2}\sum_{i,k}^N (H_{ik,rs} - H_{ik,ik}) - \sum_{i,k}^N a_i'^* a_k' \Big[\delta_{ik}E_i + H_{ki} + \\ + \frac{1}{2}\sum_r^N \big(H_{kr,ri} - H_{rk,ri} - H_{kr,ir} + H_{rk,ir}\big)\Big] + \frac{1}{2}\sum_{i,k,r,s}^N a_i'^* a_k'^* a_r' a_s' H_{rs,ik}. \quad (15)$$

Это соотношение для амплитуд дырок имеет такой же вид, как и соотношение (6a) для амплитуд электронов, и, проделав обратное преобразование, соотношение (15) можно перевести в волновое уравнение для координат дырок, записанное в $(N-n)$-мерном пространстве. Существенное различие между соотношениями (6a) и (15) состоит в том, что коэффициент при $a_i'^* a_k'$, описывающий поле возмущений отдельной дырки (без учета взаимодействия), не совпадает с коэффициентом при $a_i'^* a_k'$ для электронов. Например, в периодической системе центральное поле дырок, принадлежащих замкнутой оболочке, отличается от центрального поля электронов, принадлежащих той же замкнутой оболочке, что обусловлено взаимодействием электронов. Кроме того, в отличие от соотношения (6a), индексы матрицы H_{ik} в (15) коммутируют. Следовательно, при переходе к волновому уравнению необходимо учитывать, вещественны или комплексны собственные функции u и энергия возмущений H^l, H^{lm}. В качестве примера предположим, что $H_{ik} = H_{ki}$ и $H_{ik,rs} = H_{rs,ik}$. Пусть eU — центральное поле дырок, к обсуждению которого мы вернемся в дальнейшем, и пусть

$$\sum_i (E_i + H_{ii}) + \frac{1}{2}\sum_{i,k}(H_{ik,ki} - H_{ik,ik}) = A \quad (16)$$

(A — константа). Тогда волновое уравнение для дырок будет иметь вид

$$\left\{\sum_i^{N-n}\left(\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta^l + eU^l\right) + \sum_{l>m}^{N-n} H^{lm} + A - E\right\}\psi = 0. \quad (17)$$

Подчеркнем, что переход от (15) к (17) зависит от сделанных выше специальных предположений, которые в других случаях выглядят несколько иначе, в то время как соотношение (15) остается неизменным.

§2

Приведенные выше соображения мы теперь конкретизируем и подробно обсудим для двух проблем: самых глубоких состояний атомных спектров в периодической системе и проводимости металлов с аномальным эффектом Холла. Сначала мы рассмотрим атомные спектры и проследим за заполнением замкнутой оболочки, все электроны которой обладают одинаковым азимутальным квантовым числом l. Невозмущенные состояния таких электронов были бы перенумерованы их магнитным квантовым числом $m_l = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ и направлением их спина $m_s = \pm 1/2$. Действие остальных электронов на рассматриваемые можно описать подходящим центральным полем V^l. Энергию возмущения H^l в этом случае в достаточно хорошем приближении можно считать состоящей лишь из орбитального взаимодействия для каждого отдельного электрона. Кроме того,

$$H^{lm} = \frac{e^2}{r_{lm}}. \quad (18)$$

Если соотношение (15), задающее собственные значения, рассмотреть для электронов, *отсутствующих* в замкнутой оболочке, и сравнить с соотношением (6а), задающим собственные значения для самих электронов, то обнаружатся следующие различия. Во-первых, в соотношение (15) (соответственно, в волновое уравнение (17)) входит постоянная A, определяемая выражением (16) и задающая энергию замкнутой оболочки. Во-первых, та часть энергии отдельной дырки, которая обусловлена H^l, имеет обратный знак по сравнению с соответствующей частью энергии отдельного электрона. Для диагональных матричных элементов это утверждение тривиально. Для матричных элементов H^l_{ik} спин-орбитального взаимодействия, описывающих переходы из одного состояния в другое, доказать это можно следующим образом. Если в качестве собственных функций w_i дырок выбрать функции, комплексно-сопряженные собственным функциям электронов u_i, то есть положить$w_i = u_i^*$, то матричный элемент H^l_{ki} перейдет в

$$\int w_i^* H^l w_k \, d\tau = H'^{\,l}_{ik}.$$

Следовательно, мультиплеты атомов, в которых число дырок меньше числа электронов, *обращены*. То, что энергия дырок равна по величине и противоположна по знаку энергии электронов, разумеется, вполне очевидно, если пренебречь взаимодействием электронов. Из соотношения (15) следует, что взаимодействие дырок также имеет вид e^2/r_{lm} и совпадает с взаимодействием электронов не только по величине, но и по знаку. В то же время взаимодействие дырок дает вклад в центральное поле отдельной дырки, величину которого необходимо оценить. Начнем с рассмотрения членов

$$\frac{1}{2}\sum_r (H_{kr,ri} + H_{rk,ir}), \tag{19}$$

дополняющих в (15) член H_{ki}.

Из (7) непосредственно следует, что

$$\sum_r H_{rk,ir} = \sum_r H_{kr,ri}, \tag{20}$$

поэтому достаточно рассмотреть сумму

$$\sum_r H_{kr,ri}.$$

Из (7) следует, что эта сумма представима в виде

$$\sum_r H_{kr,ri} = \iint u_k^*(1) u_i(1) \sum_r u_r^*(2) u_r(2) \frac{e^2}{r_{12}} \, d\tau_1 \, d\tau_2. \tag{21}$$

Собственные функции $u_i(1)$ можно записать в виде произведения функции $f(r_1)$, зависящей только от радиуса, функции Лежандра $P_l^{m_l}(\cos\theta_1)$ и экспоненты $e^{im_l\varphi_1}$, зависящих, соответственно, от углов θ_1 и φ_1. Кроме того, в произведение в качестве сомножителя входит собственная функция спина $v_{m_s}(\sigma_1)$ (где $\sigma_1 = \pm 1$). Будем считать, что функция $f(r_1)$ нормирована и в качестве угловых функций выбраны

нормированные функции

$$\Pi_l^{m_l}(\theta_1) = \sqrt{\left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{(l-m_l)!}{(l+m_l)!}}P_l^{m_l}(\cos\theta_1),$$
$$N_{m_l}(\varphi_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_l\varphi_1}. \qquad (22)$$

Тогда

$$u_{m_l,m_s}(1) = f(r_1)\Pi_l^{m_l}(\theta_1)N_{m_l}(\varphi_1)v_{m_s}(\sigma_1). \qquad (23)$$

Интегрирование по $d\tau$ в (7) включает в себя суммирование по спиновой переменной, которое может быть тотчас же выполнено. Действительно, в (7) встречаются лишь переходы $k \leftrightarrow i$, при которых направление спина m_s не изменяется, а для него суммирование по σ_1 приводит к множителю 1. По той же причине суммирование по σ_2 дает в каждом члене $u_r^*(2)u_r(2)$ множитель 1. Чтобы определить коэффициенты волнового уравнения (2), необходимо вычислить еще сумму

$$S = \sum_{m_l} \Pi_l^{m_l}(\theta_2)\Pi_l^{m_l}(\theta_2)\frac{1}{2\pi}.$$

По теореме сложения сферических функций[3)]

$$S = \left[\Pi_l^0(0)\right]^2\frac{1}{2\pi} = \left(l+\frac{1}{2}\right)\frac{1}{2\pi}. \qquad (24)$$

При суммировании по r в (21) следует иметь в виду, что каждому значению m_l соответствует *два* состояния ($m_s = \pm 1/2$). Интегрирование величины e^2/r_{12} по углам θ_2 и φ_2 дает, соответственно, либо $4\pi e^2/r_1$, либо $4\pi e^2/r_2$ (в зависимости от того, какое из неравенств — $r_1 \geqslant r_2$ или $r_2 \geqslant r_1$ — выполняется). Проделав все операции, получим, что членам (19) соответствует центральное поле

$$C(r_1) = \int \sum u_r^*(2)u_r(2)\frac{e^2}{r_{12}}d\tau_2 = 2(2l+1)\left[\int_0^{r_1} r_2^2 dr_2 f^2(r_2)\frac{e^2}{r_1} + \int_{r_1}^{\infty} r_2^2 dr_2 f^2(r_2)\frac{e^2}{r_2}\right]. \qquad (25)$$

Это центральное поле в точности совпадает с электростатическим полем, создаваемым распределенным с определенной плотностью зарядом замкнутой оболочки по закону Кулона.

Рассмотрим далее члены

$$-\frac{1}{2}\sum_r (H_{kr,ir} + H_{rk,ri}).$$

И в этом случае достаточно вычислить лишь одну из двух сумм:

$$\sum_r H_{kr,ir} = \iint u_k^*(1)u_i(2)\frac{e^2}{r_{12}}\sum_r u_r^*(2)u_r(1)\,d\tau_1\,d\tau_2. \qquad (26)$$

---

3) См., например, *Sommerfeld A.* Wellenmechanischer Ergänzungsband zu Atombau und Spektrallinien. Braunschweig. S. 103.

Как и прежде, существенными оказываются только те переходы, при которых не изменяется направление спина, и суммирование по спиновым переменным приводит к появлению множителя 1. Разложим собственные функции по формуле (23) и воспользуемся для вычисления суммы (26) суммой

$$S_{12} = \sum_{m_l} \Pi_l^{m_l}(\theta_1)\Pi_l^{m_l}(\theta_2)\frac{1}{2\pi}e^{i(\varphi_2-\varphi_1)m_l}, \tag{27}$$

которая по теореме сложения сферических функций преобразуется к виду

$$S_{12} = \Pi_l^0(\chi_{12})\Pi_l^0(0)\frac{1}{2\pi}, \tag{28}$$

где χ_{12} — угловое расстояние между 1 и 2:

$$\chi_{12} = \angle(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2).$$

Произведение

$$S_{12}\frac{e^2}{r_{12}}$$

зависит только от относительного углового расстояния χ_{12} и допускает разложение по обычным сферическим функциям от $\cos\chi_{12}$. Для вычисления суммы (26) необходимо знать лишь коэффициенты сферической функции Π_l^0 в этом разложении, так как другие члены не дают вклада. Имеем:

$$S_{12}\frac{e^2}{r_{12}} = \frac{1}{2\pi}\Pi_l^0(\chi_{12})\Pi_l^0(0)\frac{e^2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\chi_{12}}} =$$
$$= \frac{1}{2\pi}\Pi_l^0(\chi_{12})\sqrt{l+\frac{1}{2}}\sum_{l'}\frac{\Pi_{l'}^0(\chi_{12})}{\sqrt{l'+\frac{1}{2}}}\left(\frac{e^2r_1^{l'}}{r_2^{l'+1}} \text{ или } \frac{e^2r_2^{l'}}{r_1^{l'+1}}\right), \tag{29}$$

где выбор члена в круглых скобках зависит от того, какое из неравенств ($r_2 \geqslant r_1$ или $r_1 \geqslant r_2$) выполняется. Если положить

$$S_{12}\frac{e^2}{r_{12}} = \sum a_s\Pi_s^0(\chi_{12}), \tag{30}$$

то коэффициент a_l можно определить из соотношения

$$a_l = \int_{-1}^{+1} S_{12}\frac{e^2}{r_{12}}\Pi_l^0(\chi_{12})\,d(\cos\chi_{12}) = \sum_{l'} b_{ll'}\left(\frac{e^2r_1^{l'}}{r_2^{l'+1}} \text{ или } \frac{e^2r_2^{l'}}{r_1^{l'+1}}\right), \tag{31}$$

где

$$b_{ll'} = \int_{-1}^{+1}\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{l+\frac{1}{2}}{l'+\frac{1}{2}}}\Pi_l^0(\chi_{12})\Pi_{l'}^0(\chi_{12})\,d(\cos\chi_{12}). \tag{32}$$

Из таблицы Гонта[4] получаем при четном l' и $2l \geqslant l'$

$$b_{ll'} = \frac{(l'!)^2(2l-l')!\left[\left(l+\frac{l'}{2}\right)!\right]^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^{3/2}}{\pi(2l+l'+1)!\left[\left(\frac{l'}{2}\right)!\right]^4\left[\left(l-\frac{l'}{2}\right)!\right]^2}, \tag{33}$$

[4] *Gaunt J. A.* Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1929, **A 228**, 151 (особенно с. 195).

и $b_{ll'} = 0$ при всех прочих значениях l и l'. Воспользуемся соотношениями (27) и (28) и заменим сферическую функцию Π_s^0 в сумме (30) разложением

$$\frac{1}{2\pi}\Pi_s^0(\chi_{12}) = \frac{1}{\Pi_s^0(0)} \sum_m \Pi_s^m(\theta_1)\Pi_s^m(\theta_2)N_m^*(\varphi_1)N_m(\varphi_2). \tag{34}$$

Нетрудно видеть, что вследствие соотношений ортогональности интегрирование по $\theta_1, \varphi_1, \theta_2, \varphi_2$ дает нуль, если не выполняются равенства $i = k$, $s = l$, $m = m_l$. Значение интеграла оказывается, таким образом, равным

$$\sum_r H_{kr,ir} = \delta_{ik} \int r_1^2\, dr_1 r_2^2\, dr_2 f^2(r_1) f^2(r_2) \frac{2\pi}{\sqrt{l+\frac{1}{2}}} \sum_{l'=0}^{2l} b_{ll'} \left(\frac{e^2 r_2^{l'}}{r_1^{l'+1}} \text{ или } \frac{e^2 r_1^{l'}}{r_2^{l'+1}} \right), \tag{35}$$

а центральное поле, обусловленное обменным взаимодействием, —

$$D(r_1) = \int_0^\infty r_2^2\, dr_2 f^2(r_2) \frac{2\pi}{\sqrt{l+\frac{1}{2}}} \sum_{l'=0}^{2l} b_{ll'} \left(\frac{e^2 r_2^{l'}}{r_1^{l'+1}} \text{ или } \frac{e^2 r_1^{l'}}{r_2^{l'+1}} \right). \tag{36}$$

При переходе от уравнения на собственные значения (15) к волновому уравнению для дырок необходимо иметь в виду, что вместо H_{ik} в (6а) в (15) всегда стоит H_{ki}. Так как собственные функции содержат единственный комплексный множитель $e^{im_l\varphi}$, то, чтобы получить волновое уравнение для дырок, аналогичное волновому уравнению (2), достаточно в качестве собственных функций для дырок взять собственные функции для электронов, изменив знаки чисел m_l на противоположные. (Это означает, что угловые моменты дырки и электрона направлены в противоположные стороны.)

Итак, волновое уравнение для дырок имеет следующий вид (здесь использованы значения $C(r_l) = C^l$, $D(r_l) = D^l$):

$$\left\{ \sum_{l=1}^{N-n} \left(\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta^l - H^l - C^l + D^l + eV^l \right) + \sum_{l>m}^{N-n} \frac{e^2}{r_{lm}} + A - E \right\} \psi = 0. \tag{37}$$

Волновым уравнением (37) можно воспользоваться вместо волнового уравнения (2), чтобы вычислить в первом приближении наиболее глубокие уровни атомов, принадлежащих одному периоду непериодической системы.

Из этого результата нетрудно извлечь без каких бы то ни было дополнительных вычислений ряд следствий, допускающих экспериментальную проверку. Различие между дырками и электронами проявляется в действующем на них центральном поле. Для лучшего согласия с экспериментом это центральное поле разумно целиком или частично находить из решения невозмущенной задачи. Собственные функции для дырок и электронов даже при одинаковом заряде ядра удобно выбирать несколько по-разному, но сделать это можно так, что различные невозмущенные центральные поля будут переходить друг в друга под действием простого преобразования подобия, как, например, в случае поля Томаса—Ферми или приближенного описания поля эффективным зарядом ядра. В обусловленном взаимодействием расщеплением невозмущенных уровней различные центральные

поля, связанные преобразованием подобия, проявляются лишь в общем постоянном множителе. Если пренебречь взаимодействием спинов, то совокупность уровней атома с n электронами отличается от совокупности уровней атома с $N - n$ электронами лишь постоянным множителем и аддитивной постоянной. Постоянный множитель всегда положителен и при равных зарядах ядра мало отличается от единицы. Что же касается расщеплений мультиплетов, то в этих двух случаях они имеют противоположные знаки.

В качестве примера[5] сравним самые глубокие уровни атома Ti, содержащего два электрона на $3d$-орбитах, и атома Ni, у которого на $3d$-орбитах находятся $I - 2 = 8$ электронов[6]. У обоих атомов имеются уровни ^3F, ^3P, ^1S, ^3D, ^3G, центры тяжести которых приведены в следующей таблице:

Таблица 1

	Ti	Ni
^3F	223	972
^3P	8 547	15 696
^1S	15 167	—
^1D	7 255	13 521
^1G	12 118	22 102

Уровень ^1S атома Ni, принадлежащий конфигурации $(3d)^8(4s)^2$, неизвестен. В следующей таблице приведены разности между различными уровнями и самым глубоким уровнем для обоих атомов, а также (в последнем столбце) отношение соответствующих разностей для Ni и Ti:

Таблица 2

	Ti	Ni	Ni/Ti
^3F	0	0	—
^3P	8 324	14 274	1,769
^1S	14 944	—	—
^1D	7 032	12 549	1,785
^1G	11 895	21 130	1,776

Нетрудно видеть, что, как и предсказывает теория, отношения разностей с высокой точностью (большей, чем следовало ожидать, исходя из точности вычислений) можно считать постоянной величиной. Это позволяет с достаточной точностью проэкстраполировать по таблице 2 недостающий уровень ^1S конфигурации $(3d)^8(4s)^2$ атома Ni. Как показывают вычисления, этот уровень равен $27\,500 \pm 150$.

Аналогичным образом сравним самые глубокие уровни иона O^{++} (с двумя $2p$-электронами) с самыми глубокими уровнями атома O (в замкнутой оболочке которого недостает двух $2p$-электронов). Соответствующие уровни[7] приведены

[5] Считаю приятным долгом выразить благодарность Ф. Хунду за ценную помощь при обсуждении экспериментальных данных.

[6] Приводимые ниже данные заимствованы из работы *Russel H. N.* Astrophys. Journ., 1927, **66**, 335 и краткого сообщения, полученного Хундом из института Рассела.

[7] Величины уровней заимствованы из работ *Fowler A.* Proc. Roy. Soc. London, 1928, **A 117**, 317; *Frerichs O.* Phys. Rev., 1930, **36**, 398.

в следующей таблице:

Таблица 3

	O^{++}	O
$^3P_0$	444 661	109 605
$^3P_1$	444 545	109 672
$^3P_2$	444 352	109 831
^1D	424 385	93 962
^1S	401 472	76 037

По аналогии с таблицей 2 образуем разности относительно центра тяжести самых глубоких уровней и вычислим частные:

Таблица 4

	O^{++}	O	O^{++}/O
^3P	0	0	—
^1D	20 066	15 791	1,2708
^1S	42 979	33 716	1,2747

И в этом случае бросается в глаза постоянство отношений.

Прежде чем мы перейдем к другому примеру волнового уравнения для дырок, уместно сделать несколько общих замечаний. Если $X(x, y, z, \sigma)$ — какой-нибудь оператор, относящийся к одному электрону, например, ток, плотность тока, момент импульса электрона, то в схеме Иордана—Вигнера ему соответствует оператор

$$\sum_{i,k} a_i^* a_k X_{ik}, \tag{38}$$

где

$$X_{ik} = \int u_i^* X u_k \, d\tau. \tag{39}$$

Если перейти к штрихованным амплитудам, то

$$\sum_{i,k} a_i^* a_k X_{ik} = \sum_{i,k} (\delta_{ik} - a_k'^* a_i') X_{ik} = \sum_i X_{ii} - \sum_{i,k} a_i'^* a_k' X_{ki}. \tag{40}$$

Полный аналог соотношений (38) к (39) получается из соотношения (40) лишь в том случае, если X_{ki} можно представить в виде

$$X_{ki} = \int w_i^* X w_k \, d\tau = X'_{ik}, \tag{41}$$

где w_i — собственные функции дырок. В приведенных выше вычислениях мы полагали $w_i = u_i^*$ (см. с. 263), что позволяет для вещественного оператора X, зависящего только от координат, вывести (41) из (39). Если же X — оператор другого рода, то переход от (39) к (41) необходимо каждый раз обосновывать заново. Общий результат удается получить лишь для *диагональных элементов* X_{ii}: плотность тока, момент количества движения, плотность заряда и т. д. для дырки всегда имеет противоположный знак по сравнению с соответствующей величиной для электрона.

§3

В качестве второго примера применения «волнового уравнения для дырок» рассмотрим аномальный эффект Холла в интерпретации Пайерлса[8]. «Эта задача отличается особенной простотой потому, что взаимодействием электронов в данном случае можно пренебречь: невозмущенная система состоит из электронов, движущихся в трехкратно периодическом силовом поле кристаллической решетки (с потенциалом eV_0). В качестве возмущений выступают внешнее электрическое и внешнее магнитное поле, а также отклонения от периодичности решетки eV_1, обусловленные тепловым движением. С учетом всех возмущений волновое уравнение для отдельного электрона принимает следующий вид:

$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - e(V_0+V_1) - eF_x x - \frac{he}{4\pi i\mu c}H_z\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \right. \\ \left. + \frac{e^2}{8\mu c^2}H_z^2(x^2+y^2) + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\right\}\psi = 0. \qquad (42)$$

Здесь F_x означает электрическое поле по оси x (электроны ускоряются в положительном направлении оси x), а магнитное поле H_z направлено по оси z. Чтобы члены с F_x и H_z можно было считать малым возмущением, необходимо в качестве исходного решения взять не слишком большой волновой пакет и выбрать начало координат вблизи него. Член с H_z^2 в этом случае становится пренебрежимо малым, и волновое уравнение в рассматриваемом приближении принимает следующий вид:

$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - e(V_0+V_1) - eF_x x - \frac{he}{4\pi i\mu c}H_z\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}\right\}\psi = 0. \qquad (42a)$$

Как показал Блох[9], собственные функции имеют вид

$$\psi_{klm} = \exp\left\{2\pi i\left(\frac{kx}{K} + \frac{ly}{L} + \frac{mz}{M}\right)\right\}u_{klm}(x,y,z), \qquad (43)$$

где K, L, M — длины ребер элементарного прямоугольного параллелепипеда, задающего периодические краевые условия; $u_{klm}(x,y,z)$ — функция, обладающая периодичностью кристаллической решетки; k, l, m — трансляционные квантовые числа. При достаточно глубоких потенциальных ямах V_0 достаточно близкие соседние уровни, задаваемые формулой:

$$E_{klm} = \text{const} - 2\beta\left(\cos\frac{2\pi ka}{K} + \cos\frac{2\pi la}{L} + \cos\frac{2\pi ma}{M}\right), \qquad (44)$$

где a — постоянная решетки, можно объединить в отдельные группы. Такая группа, заполненная электронами, образует замкнутую оболочку. Перейдем теперь от волнового уравнения (42a) к уравнению на собственные значения типа уравнения (6a) и далее к уравнению (15) на собственные значения для дырок. Матричные элементы переходов H_{ik} в (6a) теперь имеют вид $H_{klm,k'l'm'}$. Чтобы от уравнения (15) на собственные значения снова перейти к волновому уравнению для дырок, необходимо определить собственную функцию отдельной дыры.

[8] *Peierls R.* Zs. Phys., 1929, **53**, 255.

[9] *Bloch F.* Zs. Phys., 1928, **52**, 555.

По Блоху[10], собственную функцию (43) отдельного электрона приближенно можно представить в виде

$$\psi_{klm} = \sum_{g_1, g_2, g_3} \exp\left\{2\pi i \left(\frac{g_1 k}{G_1} + \frac{g_2 l}{G_2} + \frac{g_3 m}{G_3}\right)\right\} v_{g_1 g_2 g_3}(x, y, z), \tag{45}$$

где $v_{g_1 g_2 g_3}$ — шредингеровская функция атома с номером g_1, g_2, g_3; G_1, G_2, G_3 — число атомов на ребрах K, L, M элементарного параллелепипеда.

Пусть по определению

$$\psi'_{klm} = \sum_{g_1, g_2, g_3} \exp\left\{-2\pi i \left[g_1\left(\frac{k}{G_1} + \frac{1}{2}\right) + g_2\left(\frac{l}{G_2} + \frac{1}{2}\right) + g_3\left(\frac{m}{G_3} + \frac{1}{2}\right)\right]\right\} v^*_{g_1 g_2 g_3} \tag{46}$$

— собственная функция отдельной дырки. Для оператора X, зависящего только от координат, выполняется (правда, только в первом приближении) соотношение

$$X_{k'l'm';\, klm} = X'_{klm;\, k'l'm'},$$

аналогичное соотношению (4). Оно остается в силе до тех пор, покуда в интеграле $\int \psi^*_{k'l'm'} X \psi_{klm}\, d\tau$ мы будем учитывать только члены вида $\int v^*_{g_1 g_2 g_3} v_{g_1 g_2 g_3} X\, d\tau$ и пренебрегать элементами $\int v^*_{g_1 g_2 g_3} v_{h_1 h_2 h_3} X\, d\tau$, описывающими переходы. Операторы, зависящие только от координат, заведомо позволяют пренебречь членами указанного вида. Итак, мы получаем

$$[eV_1 + eF_x x]_{k'l'm';\, klm} = [eV_1 + eF_x x]'_{klm;\, k'l'm'}. \tag{47}$$

Невозмущенная энергия $\left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - eV_0\right)$ и член, пропорциональный H_z, требуют особого рассмотрения. Из соотношений (44) и (46) тотчас же следует равенство

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - eV_0\right)'_{klm;\, klm} = \text{const} - \left(-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - eV_0\right)_{klm;\, klm}, \tag{48}$$

так как при замене k на $k + \frac{g}{2}$ член $\cos\frac{2\pi k a}{K}$ изменяет знак.

Наконец, нам осталось рассмотреть матричные элементы оператора $x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}$. При интегрировании по объему члены вида

$$\int v_{g_1 g_2 g_3}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) v_{g_1 g_2 g_3}\, d\tau$$

выпадают, если, как предполагалось, атомы первоначально находились в S-состояниях. Остаются лишь матричные элементы, описывающие переходы, при которых числа g_1, g_2, g_3 изменяются на единицу. Если учесть происходящее при этом изменение знаков, то

$$\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)_{k'l'm';klm} = \int \psi^*_{k'l'm'}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi_{klm}\, d\tau \approx$$
$$\approx -\int \psi'_{k'l'm'}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi'^*_{klm}\, d\tau =$$
$$= \int \psi'^*_{klm}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi'_{k'l'm'}\, d\tau = \left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)'_{klm;k'l'm'}. \tag{49}$$

[10] *Bloch F.* Op. cit.

Таким образом, учитывая соотношение (47), (48), (49), получаем из (15) волновое уравнение для дырок

$$\left\{-\frac{h^2}{8\pi^2\mu}\Delta - eV_0 + eV_1 + eF_x x + \frac{he}{4\pi i\mu c}H_z\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right) + \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t} + \text{const}\right\}\psi = 0. \quad (50)$$

Это уравнение также выполняется лишь для волновых пакетов дырок, движущихся в окрестности начала координат. Сравнив волновое уравнение (50) с волновым уравнением (42а), нетрудно заметить, что дырки движутся точно так же, как электроны с *положительным* зарядом под действием внешних возмущающих полей. С другой стороны, в ток и в плотность заряда дырки вносят такой же заряд, как электроны с *положительным* зарядом. Таким образом, электропроводность в металлах с малым числом дырок во всех отношениях допустимо описывать, как электропроводность в металлах с малым числом *положительных* электронов проводимости. Отсюда непосредственно следует аномальный эффект Холла для таких металлов.

Выводы

Атомные системы, в замкнутой оболочке которых недостает n электронов, приближенно можно описывать, решая уравнение Шредингера относительно координат и «дырок». В качестве примеров применения предлагаемого метода рассмотрены наиболее глубокие термы атомных спектров и аномальный эффект Холла.

ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ СОВРЕМЕННОЙ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ*

Если квантовую теорию волновых полей представить в таком виде, чтобы ее релятивистская инвариантность была распознаваема особенно просто, то становится возможным выделить несколько умозрительных гипотез относительно границ, в рамках которых применимость современной квантовой теории полей обоснована (глава 1). Эти гипотезы применены к некоторым специальным вопросам (глава 2). В заключение рассмотрены некоторые явления, лежащие вне круга применимости современной теории (глава 3).

Как известно, расходимости, возникающие в квантовой теории волновых полей, до сих пор препятствуют формулировке в замкнутой форме[1] квантовой теории элементарных частиц, которая позволила бы объяснить явления, наблюдаемые в ядерной физике и в космических лучах. Это обстоятельство наводит на мысль о том, что в теории элементарных частиц существенную роль играет некая универсальная постоянная, имеющая размерность длины, и что все расходимости исчезнут, если должным образом учесть эту постоянную[2]. С этой точки зрения расходимости, возникающие в современной волновой теории, можно сравнить с расходимостью, некогда возникавшей в теории излучения абсолютно черного тела, устранить которую удалось лишь после того, как было понято, что в теорию излучения необходимо внести универсальную постоянную $\hbar$. По данным ядерной физики универсальная длина по порядку величины сравнима с классическим радиусом электрона $r_0 = 2{,}81 \cdot 10^{-13}$ см. Среди характерных проявлений универсальной длины можно назвать существование элементарных частиц с массой около $\hbar/r_0c$ (к их числу принадлежат нейтроны, протоны и тяжелые электроны), ядерные силы, действующие на расстоянии r_0 и, наконец, взрывообразные процессы при столкновении частиц с энергией, превышающей $\hbar c/r_0$ в системе центра масс. В то же время можно предположить, что универсальная длина указывает границы применимости современной теории так же, как $\hbar$ и c определяют границы применимости классической физики. Так как длина отрезка не является релятивистски инвариантной величиной и поэтому не вполне понятно, каким образом постоянная, имеющая размерность длины, может устанавливать пределы релятивистски инвариантной теории, то мы попытаемся уточнить эти пределы. Вместе с тем необходимо подчеркнуть: утверждение о том, что универсальная длина имеет величину порядка классического радиуса электрона, оставляет сравнительно большой допуск для истинного значения универсальной длины. Величина $r_0 = 2{,}81 \cdot 10^{-13}$ см в наших расчетах служит верхней границей для этой постоянной, и, возможно, было бы правильнее заменить r_0 в 5

---

* Die Grenzen der Anwendbarkeit der bischerigen Quantentheorie. — Zs. Phys., 1938, **110**, 251–266. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Pauli W.* Hand. Phys., 24, 269.

[2] *Bohr N.* Kongress in Rom, 1931, S. 121; Solvay—Bericht, 1933, S. 216; *Born M.* Proc. Roy. Soc. London, 1933, (A) 143, 410; 1938, **165**, 291; *March A.* Zs. Phys., 1936, **104**, 93; *Heisenberg W.* Ann. Phys., 1938, **32**, 20.

или 10 раз меньшей величиной. Неопределенность в выборе универсальной длины пока неизбежна. Впрочем, и в квантовой механике строгая теория может уточнить представление о фазовом пространстве, разбитом на ячейки величиной h, лишь до неравенства $\Delta p \Delta q \geqslant h/4\pi$.

I
УСТАНОВЛЕНИЕ ГРАНИЦ
§1

Прежде всего необходимо кратко описать математический аппарат релятивистски инвариантной теории волновых полей в том виде, в каком он представляется нам, если отвлечься от расходимостей. Волновые функции в такой теории соответствуют определенному числу частиц. Таковы, например, электромагнитные волны, представляющие кванты света, волны де Бройля электронов и т. д. Для каждой волновой функции существует канонически сопряженная функция, и между канонически сопряженными функциями возникают обычные коммутационные соотношения. Функция Гамильтона содержит интеграл от квадратичного относительно волновых функций выражения, соответствующего кинетической энергии свободных частиц и, кроме того, члены, описывающие взаимодействия. В большинстве простых случаев эти энергии взаимодействия представляют собой интегралы по пространству от некоторого скаляра, построенного более чем из двух волновых функций частиц различных сортов. Волновые функции допускают разложение по плоским волнам, если потребовать выполнения любого условия периодичности:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum c_{\mathbf{k}}^{\lambda} a_{\mathbf{k}}^{\lambda}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \tag{1}$$

где $c_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ — нормировочные постоянные, а величины $a_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ должны удовлетворять обычным соотношениям

$$a_{\mathbf{k}}^{*\lambda} a_{\mathbf{l}}^{\mu} + a_{\mathbf{l}}^{\mu} a_{\mathbf{k}}^{*\lambda} = \delta_{\mathbf{lk}} \delta_{\mu\lambda}, \quad a_{\mathbf{k}}^{*\lambda} a_{\mathbf{k}}^{\lambda} = N_{\mathbf{k}}^{\lambda}, \tag{2}$$

$N_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ означает число частиц сорта λ с импульсом $\mathbf{k}$ и имеет собственные значения 0 и 1 (если предположить, например, что выполняется принцип Паули).

Квантовая теория описывает поведение функционала, представляющего состояние системы. Этот функционал может зависеть, например, от $N_{\mathbf{k}}^{\lambda}$. Временнóе изменение функционала $\Phi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda}, \ldots, t)$ определяется уравнением

$$H\Phi = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \tag{3}$$

где H — обычная функция Гамильтона, $a_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ — операторы, переводящие $N_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ в $1 - N_{\mathbf{k}}^{\lambda}$. Функция Гамильтона выражается через операторы $a_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ следующим образом:

$$H = \sum N_{\mathbf{k}}^{\lambda} E_{\mathbf{k}}^{\lambda} + \int H_{\mathbf{kk'k''k'''}}^{\varkappa\lambda\mu\nu} a_{\mathbf{k'}}^{*\lambda} a_{\mathbf{k''}}^{*\mu} a_{\mathbf{k'''}}^{*\nu} e^{i(\mathbf{k'}+\mathbf{k'''}-\mathbf{k}-\mathbf{k''})\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \tag{4}$$

где $E_{\mathbf{k}}^{\lambda}$ означает энергию свободных частиц с импульсом $\mathbf{k}$, а интегральный член — энергию взаимодействия. Если ввести обозначение

$$\chi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda}, \ldots, t) = \Phi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda}, \ldots, t)\, e^{\frac{i}{\hbar} \sum\limits_{\mathbf{k},\lambda} E_{\mathbf{k}}^{\lambda} N_{\mathbf{k}}^{\lambda} t}, \tag{5}$$

то χ будет удовлетворять уравнению

$$i\hbar e^{-\frac{i}{\hbar}\sum E_{\mathbf{k}}^{\lambda}N_{\mathbf{k}}^{\lambda}t}\frac{\partial\chi}{\partial t}=\sum H_{\mathbf{kk'k''k'''}}^{\varkappa\lambda\mu\nu}e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{k}'''-\mathbf{k}-\mathbf{k}'')\mathbf{r}}d\mathbf{r}a_{\mathbf{k}}^{*\varkappa}a_{\mathbf{k}'}^{*}{}^{\lambda}a_{\mathbf{k}''}^{*}{}^{\mu}a_{\mathbf{k}'''}^{*}{}^{\nu}e^{-\frac{i}{\hbar}\sum E_{\mathbf{k}}^{\lambda}N_{\mathbf{k}}^{\lambda}t}\chi, \tag{6}$$

или

$$\chi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda},\ldots,t+dt)=$$
$$=\left(1-\frac{idt}{\hbar}\right)\int d\mathbf{r}H_{\mathbf{kk'k''k'''}}^{\varkappa\lambda\mu\nu}e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{k}'''-\mathbf{k}-\mathbf{k}'')\mathbf{r}-\frac{i}{\hbar}(E'+E'''-E-E'')t}a_{\mathbf{k}}^{*\varkappa}a_{\mathbf{k}'}^{*}{}^{\lambda}a_{\mathbf{k}''}^{*}{}^{\mu}a_{\mathbf{k}'''}^{*}{}^{\nu}\chi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda},\ldots,t). \tag{7}$$

В такой записи отчетливо видно, каким образом влияют на изменение состояния свободных частиц процессы перехода, описываемые операторами энергии взаимодействия. Простое обобщение уравнения (7) приводит к соотношению

$$\chi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda},\ldots,t)=\prod\left\{1-\frac{i}{\hbar}\,d\omega\sum e^{i(\mathbf{k}'+\mathbf{k}'''-\mathbf{k}-\mathbf{k}'')\mathbf{r}-\frac{i}{\hbar}(E'+E'''-E-E'')t}\times\right.$$
$$\left.\times H_{\mathbf{kk'k''k'''}}^{\varkappa\lambda\mu\nu}a_{\mathbf{k}}^{*\varkappa}a_{\mathbf{k}'}^{*}{}^{\lambda}a_{\mathbf{k}''}^{*}{}^{\mu}a_{\mathbf{k}'''}^{*}{}^{\nu}\right\}\chi(N_{\mathbf{k}}^{\lambda},\ldots,t). \tag{8}$$

Произведение по $d\omega$ ($d\omega$ — четырехмерный элементарный объем $d\mathbf{r}\,dt$) следует распространить на всю область пространства, заключенную между временными сечениями t_0 и t_1. Эти сечения не обязательно должны быть параллельными, но непременно должны лежать во всей пространственной области, в которой разыгрывается процесс. Кроме того, должно выполняться неравенство $t_1 > t_0$. При составлении произведения следует не забывать о некоммутативности сомножителей и поэтому всегда следить за тем, чтобы они были упорядочены по времени, т. е. чтобы множители стояли тем левее, чем большим значениям времени они соответствуют. Под действием преобразования Лоренца временное упорядочение не изменяется. Таким образом, релятивистская инвариантность всего формализма видна непосредственно из уравнения (8), если вспомнить, что плотность энергии взаимодействия — скаляр и, следовательно, лоренц-инвариантна. Если энергию взаимодействия рассматривать как малое возмущение, то из (8) нетрудно вывести известные формулы для перехода системы в другое состояние. Если для упрощения обозначений мы будем задавать состояние не набором импульсов частиц, а индексом $(i, k, \ldots)$, то для перехода из состояния i в состояние k получится формула

$$\chi_k(t_1)=\left\{\delta_{ki}-\frac{i}{\hbar}H_{ki}\int_{t_0}^{t_1}e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_i)t}\,dt+\right.$$
$$\left.+\sum_l\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2H_{kl}H_{li}\int_{t_0}^{t_1}dt'e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_l)t'}\int_{t_0}^{t_1}dt''e^{\frac{i}{\hbar}(E_l-E_i)t''}+\ldots\right\}\chi_i(t_0). \tag{9}$$

Величины H_{ki} означают интегралы по пространству от членов, описывающих в уравнении (8) взаимодействие. Следовательно, соответствуют переходам, при которых импульс сохраняется. При выводе формулы (9) предполагается, что сечения t_1 и t_0 параллельны, т. е. соотношение (9) связано с определенной системой координат. Если из начального состояния i в конечное состояние k можно перейти за несколько шагов (переходы $k \to l$), то первый член ряда (9) обращается в нуль.

Например, если для перехода необходимо совершить по крайней мере два шага, то в первом приближении соотношение (9) имеет вид

$$\chi_k(t_1) = \sum_l H_{kl}H_{li}\left\{\frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_i)t_1} - e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_i)t_0}}{(E_k-E_i)(E_l-E_i)} - \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_l)t_1} - e^{\frac{i}{\hbar}(E_k-E_l)t_0}}{(E_k-E_l)(E_l-E_i)}e^{\frac{i}{\hbar}(E_l-E_i)t_0}\right\}\chi_i(t_0). \tag{10a}$$

В силу закона сохранения энергии первый член выражения, стоящего в скобках, приводит к возрастанию собственной функции состояния k, что видно непосредственно из (9).

Если суть приводимых нами вычислений резюмировать в нескольких словах, то ее можно сформулировать следующим образом: квантовая механика требует существования функционалов состояния. Каким образом изменяется этот функционал за интервал времени от t до $t + dt$, зависит от энергии взаимодействия, относительно которой квантовая теория не дает никаких предписаний. Энергия взаимодействия должна удовлетворять только требованиям теории относительности. Изменение функционала за продолжительный промежуток мы получим, проинтегрировав дифференциальное уравнение.

Как теперь известно, такой формализм, закладываемый как программа в основу любой квантовой теории волновых полей, приводит к возникновению расходимостей и, следовательно, не может существовать в своем современном виде. Возникает вопрос, в каком смысле этот формализм, несмотря на все изъяны, можно рассматривать как приближение к истинным законам.

§2

Так как границы области применимости квантовой теории должна задавать универсальная постоянная размерности длины, то представляется естественным считать сомнительной компонентой теории входящую в соотношение (9) бесконечно малую область пространства-времени $d\omega$. Можно предположить, что в будущую теорию вместо $d\omega$ будет входить конечная область пространства-времени, имеющая по каждому направлению протяженность порядка r_0. Разумеется, ныне разбиение пространства релятивистски инвариантным образом не осуществимо, к тому же будущая теория не будет построена по точному подобию современной теории. Тем не менее вполне допустимо предположить, что во всех случаях, когда согласно формализму квантовой механики — mutatis mutandis — при замене пространственно-временных областей бесконечно малых размеров конечными областями критических размеров должны возникать только слабые поля, современный формализм в некотором приближении остается в силе. Во всех же случаях, когда существенно разбиение на еще меньшие области пространства-времени, квантовая механика отказывает. В дальнейшем мы исследуем это предположение более подробно.

Интегрирование по пространству (8) в дальнейшем можно считать выполненным, поэтому разбиение пространства на ячейки конечных размеров не будет играть никакой роли. Относительно временных изменений (см. (9)) будем предполагать (гипотеза I), что в тех случаях, когда за время r_0/c следует ожидать лишь малых изменений физической системы, существует оператор, позволяющий по $\chi(t)$ строить $\chi(t + \Delta t)$ с ошибкой порядка $r_0/c\Delta t$. Этот оператор обладает некоторым заслуживающим более подробного рассмотрения подобием с оператором, стоящим в (7) и (9). Величина Δt должна быть большой по сравнению с r_0/c, но малой по сравнению с временем T, за которое следует ожидать значительных изменений физической системы. Предположение о существовании такого оператора, по-видимому, необходимо для того, чтобы вообще понять весьма важное обстоятельство:

квантовая механика хорошо описывает многие системы, например, электронные оболочки, и поэтому ее можно рассматривать как предельный случай будущей теории, в которой r_0 допустимо считать бесконечно малой величиной.

Оператор, осуществляющий переход от $\chi(t)$ к $\chi(t+\Delta t)$, необходимо связать с функцией Гамильтона, которую было бы желательно положить в основу волновой теории и вывести из классической теории или заимствовать из квантовой механики. Напрашивается мысль, что связь между оператором и функцией Гамильтона можно установить, приняв следующую гипотезу (гипотезу II):

оператор, переводящий $\chi_i(t)$ в $\chi_i(t+\Delta t)$ с точностью до ошибки, которая тем меньше, чем меньше $r_0/c\Delta t$ или $\Delta t/T$, совпадает с первым отличным от нуля членом оператора в правой части (9).

Прежде всего заметим, что эта гипотеза совместима с адекватностью квантовой механики при больших временах. Действительно, утверждая, что Δt должно быть мало по сравнению с временем T, за которое физическая система претерпевает значительные изменения, мы тем самым достигаем в квантовой механике малости членов более высокого порядка по $\frac{i}{\hbar}H\Delta t$ по сравнению с членом низшего порядка. Согласуется эта гипотеза и с требованиями теории относительности, в чем нетрудно убедиться непосредственно из вывода соотношения (9). Напротив, гипотеза II не совместима с предположением о том, что квантовая механика применима к процессам, в которых система сильно изменяется за время r_0/c. Действительно, если бы формализм (7) оставался в силе для таких процессов, то в операторе (9) при переходе от t к $t+\Delta t$ было бы необходимо учитывать высшие члены по H, что вновь привело бы к давно известным трудностям с расходимостями. Взятые вместе, гипотезы I и II вполне точно описывают вычислительную процедуру, разработанную при практическом применении формализма (7).

§3

Необходимо уточнить, что следует понимать в гипотезе I под «малыми изменениями». Отбрасывание старших членов по $\frac{i}{\hbar}H\Delta t$ можно считать допустимым, если потребовать, чтобы сумма по конфигурационному пространству

$$\sum_N \chi(N_k^\lambda, t)\chi(N_k^\lambda, t+\Delta t)$$

не слишком отличалась от единицы (величины $\chi(N_k^\lambda, t)$ считаются нормированными). Таким образом, «малые изменения» можно определить как такие изменения, для которых выполняется неравенство

$$\left|1-\sum_N \chi(N_k^\lambda, t)\chi(N_k^\lambda, t+\Delta t)\right| \ll 1. \tag{10}$$

Это определение выполняется всюду, где изменения системы вызваны взаимодействиями, известными из классической физики или из квантовой теории атомных оболочек. В теории же элементарных частиц главное значение приобретает другая часть функции Гамильтона, а именно та, которая содержит члены, описывающие ядерные силы и β-распад, так как именно они вводят в теорию универсальную длину в решающем месте. Нельзя не упомянуть и о том, что эти члены точно не известны. Сомнительно также, чтобы новые взаимодействия имело смысл выражать как составные части функции Гамильтона, поскольку в общем случае соответствующие члены невозможно использовать, не учитывая при этом связанные с универсальной длиной

неквантовомеханические особенности. Поэтому представляется целесообразным попытаться с помощью соображений инвариантности заняться поисками правдоподобного определения «малого изменения», применимого к взаимодействиям, в которых существенную роль играет универсальная длина r_0. Прежде всего напрашивается мысль считать изменения малыми, если для каждой элементарной частицы приращение импульса удовлетворяет неравенству $|\mathbf{p}| \ll \hbar/r_0$. Однако такое определение заведомо не было бы релятивистски инвариантным. Можно поступить иначе и отнести изменение импульса к той системе координат, в которой оно имеет наименьшее значение. Квадрат наименьшего изменения импульса достигается в том случае, если частица из состояния с импульсом $\mathbf{p}_{\rm I}$ и энергией $E_1 = p_{\rm I}^0 c$ переходит в состояние с импульсом $\mathbf{p}_{\rm II}$ и энергией $E_2 = p_{\rm II}^0 c$, задаваемыми инвариантным выражением

$$(\mathbf{p}_{\rm I} - \mathbf{p}_{\rm II})^2 - (p_{\rm I}^0 - p_{\rm II}^0)^2.$$

Изменение импульса достигает наименьшего значения в той системе координат, в которой энергия не изменяется. Это наводит на мысль дать следующее определение: изменение состояния элементарных частиц называется малым, если абсолютная величина разности 4-векторов $\mathbf{p}_{\rm I}, p_{\rm I}^0$ и $\mathbf{p}_{\rm II}, p_{\rm II}^0$ мала по сравнению с $\hbar/r_0$, т.е. если

$$|(\mathbf{p}_{\rm I} - \mathbf{p}_{\rm II})^2 - (p_{\rm I}^0 - p_{\rm II}^0)^2| \ll \left(\frac{\hbar}{r_0}\right)^2. \tag{11}$$

Наоборот, если выполняется неравенство

$$|(\mathbf{p}_{\rm I} - \mathbf{p}_{\rm II})^2 - (p_{\rm I}^0 - p_{\rm II}^0)^2| \gg \left(\frac{\hbar}{r_0}\right)^2, \tag{12}$$

то можно говорить о больших изменениях. Если мы рассматриваем процесс, в котором возникает новая частица, то в начальном состоянии следует положить $\mathbf{p}_{\rm I} = p_{\rm I}^0 = 0$. Если в результате какого-то процесса частица уничтожается, то необходимо положить $\mathbf{p}_{\rm II} = p_{\rm II}^0 = 0$. В частности, это означает, что с точки зрения принятого нами определения рождение кванта света или легкого электрона всегда можно считать малым изменением.

Следующее рассуждение показывает, что условие (11) выводимо из (10), если универсальная длина входит в функцию Гамильтона достаточно простым образом. Предположим для простоты, что существует только один сорт частиц без спина, но с положительными и отрицательными зарядами, как в теории Паули и Вайскопфа[3]. Тогда функция Лагранжа свободных частиц имеет вид

$$L = \frac{\hbar c}{2}\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \operatorname{grad}\varphi^* \operatorname{grad}\varphi - \left(\frac{\mu c}{\hbar}\right)^2\varphi^*\varphi\right).$$

Если в эту функцию ввести член старшего порядка, то его необходимо выбрать так, чтобы вносимый им вклад обращался в нуль для отдельной частицы, т.е. для плоской волны, иначе изменится масса покоя свободных частиц[4]. Простейший

[3] *Pauli W., Weisskopf W.* Helv. Phys., 1934, 7, 709.

[4] См., например, варианты электродинамики с дополнительным членом высшего порядка, предложенные в работах *Born M., Infeld L.* Phys. Rev., 1934, **144**, 425; *Euler H., Kookel B.* Naturwissensch., 1935, **23**, **246**.

член такого вида имеет, например, следующий вид:

$$L = \frac{\hbar c}{2}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \operatorname{grad}\varphi^*\operatorname{grad}\varphi - \left(\frac{\mu c}{\hbar}\right)^2\varphi^*\varphi\right) +$$
$$+\hbar c f\left(\frac{1}{c^2}\frac{\partial\varphi^*}{\partial t}\frac{\partial\varphi}{\partial t} - \operatorname{grad}\varphi^*\operatorname{grad}\varphi - \left(\frac{\mu c}{\hbar}\right)^2\varphi^*\varphi\right).$$

Постоянная f имеет размерность см^4 и имеет величину порядка $\sim r_0$. Член, описывающий в L взаимодействие, по существу, совпадает с членом, описывающим взаимодействие в функции Гамильтона. Но поскольку мы хотим оценить вклад этого члена сначала без обращения к квантовой теории, то исходить можно непосредственно из L. Пусть задано два волновых пакета со средними импульсами $\mathbf{p}_\mathrm{I}$ и $\mathbf{p}_\mathrm{II}$ и протяженностью примерно $l_\mathrm{I} \sim \hbar/|\mathbf{p}_\mathrm{I}|$ и $l_\mathrm{II} \sim \hbar/|\mathbf{p}_\mathrm{II}|$, входящих во взаимодействие. Волновые функции имеют в пакетах амплитуды порядка $\sim 1/l_\mathrm{I}$ и $1/l_\mathrm{II}$. Если происходит наложение волновых пакетов, то член функции Лагранжа L, проинтегрированный по части пространства V_{12}, принадлежащей обоим пакетам одновременно, имеет величину порядка

$$\frac{cf}{\hbar^3}\left[p_\mathrm{I}^0 p_\mathrm{II}^0 - \mathbf{p}_\mathrm{I}\mathbf{p}_\mathrm{II} - (\mu c)^2\right]^2 \frac{V_{12}}{l_\mathrm{I}^2 l_\mathrm{II}^2}.$$

Эту величину необходимо сравнить с $1/l_\mathrm{I}$ и $1/l_\mathrm{II}$. Если l_I и l_II — величины одного и того же порядка, то член, описывающий взаимодействие, меньше энергии свободных волновых пакетов примерно в

$$\frac{f\left[p_\mathrm{I}^0 p_\mathrm{II}^0 - \mathbf{p}_\mathrm{I}\mathbf{p}_\mathrm{II} - (\mu c)^2\right]^2}{\hbar^4}$$

раз. Если, следуя гипотезе I, потребовать, чтобы это выражение было мало по сравнению с единицей, т. е. чтобы взаимодействие было малым возмущением, то при $f \sim r_0^4$ мы снова прийдем к неравенству (11). Маловероятно, что другие функции Гамильтона приведут к условиям, существенно отличающимся от неравенства (11).

В гипотезы I и II входит время Δt. Для более точной формулировки условий, которым должно удовлетворять Δt, для каждой отдельной частицы необходимо ввести четырехмерное расстояние $\Delta\tau$ между мировыми точками I и II, в которых частица находится в момент времени t и $t + \Delta t$. Для интервала $\Delta\tau$ должно выполняться неравенство $\Delta\tau \gg r_0/c$. За время $\Delta\tau$ 4-векторы $\mathbf{p}_\mathrm{I}, p_\mathrm{I}^0$ и $\mathbf{p}_\mathrm{II}, p_\mathrm{II}^0$ можно определить с точностью, не превышающей $\hbar/c\Delta\tau$. Но так как $\Delta\tau \gg r_0/c$, то этой точности достаточно, чтобы установить, какое из двух неравенств — (11) или (12) — выполняется.

Итак, гипотезу I можно теперь сформулировать более точно:

приближенное количественное описание процесса на основе формул квантовой механики возможно в том и только в том случае, если в любой момент времени для каждой участвующей в процессе частицы можно указать временной интервал $\Delta\tau \gg r_0/c$, такой, что за этот интервал частица претерпевает только малые изменения в смысле (10) *и* (11).

Пригодный для рассмотренного нами применения квантовой механики оператор Гамильтона определяется гипотезой II.

II

ПРИМЕНЕНИЯ ГИПОТЕЗ I И II

§1

Гипотезы I и II, прежде всего, гарантируют применимость квантовой механики в известных областях, каждую из которых ранее приходилось рассматривать специальными методами. Но существуют предельные случаи, в которых вопрос о применимости квантовой механики не имеет прямого ответа и нуждается в дополнительном обсуждении.

Прежде всего выясним, подчиняется ли законам квантовой механики движение протонов и нейтронов в ядре. Рассмотрим, например, дейтрон. Средняя кинетическая энергия на одну частицу составляет в дейтроне примерно $0{,}004\,Mc^2$, что соответствует импульсу $p \sim 0{,}09\,Mc$ и скорости $0{,}09c$. Радиус действия ядерных сил порядка r_0. Того же порядка и расстояние между протоном и нейтроном в дейтроне. За время $\Delta t = 2r_0/c$ протон, движущийся со скоростью $0{,}09c$, проходит расстояние $0{,}18r_0$ и, описывая окружность диаметром r_0, изменяет свой импульс на величину

$$\Delta p = 0{,}18\,Mc \sin 0{,}18 \sim 0{,}032\,Mc \approx 0{,}44\frac{\hbar}{r_0}.$$

Но при $\Delta t \sim 2r_0/c$ и $\Delta p \sim 0{,}4\hbar/r_0$ условия (11) применимости квантовой механики еще выполняются. Впрочем, поскольку в квантовой механике атомного ядра условия (11) выполняются плохо, необходимо учитывать возможность большой ошибки.

§2

Гипотезы I и II дают определенный ответ на вопрос, в какой мере можно говорить о длине волны и соотношении де Бройля для частиц с очень высокой энергией. На первый взгляд кажется, что при длинах волн порядка r_0 следует ожидать совершенно новые явления или, по крайней мере, что невозможно экспериментально измерить длины волн меньше r_0, но такое мнение неверно.

Рассмотрим сначала дифракцию волн (материи или световых) на решетке и предположим, что падающие на решетку частицы обладают импульсом много больше $\hbar/r_0$. Так как решеток, у которых расстояние между штрихами было бы меньше r_0, не существует, то наблюдать дифракцию можно лишь в том случае, если волны падают на решетку, почти скользя по ее поверхности. Пусть d — расстояние между соседними штрихами решетки (рис. 1), $\mathbf{p}$ — импульс частиц до, а $\mathbf{p}'$ — после отражения от решетки, ось x выбрана параллельной поверхности решетки, ось y — по нормали к решетке, θ — угол падения и θ' — угол отражения. Так как периодическая решетка может переносить в направлении оси x только импульсы, кратные h/d, то из соотношения $p'_x = p_x \pm n(h/d)$ (n — целое число) известным способом получаем

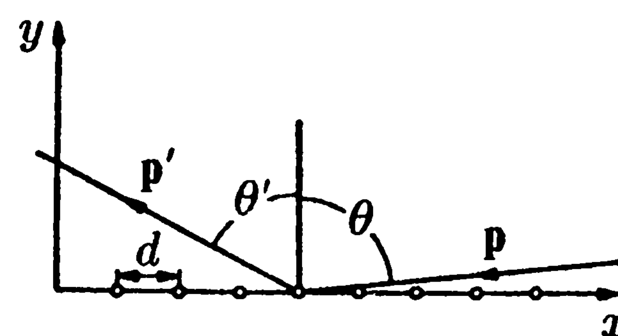


Рис. 1. Рассеяние на решетке

$$p' \sin\theta' = p\sin\theta \pm n\frac{h}{d},$$

$$\sin\theta' = \sin\theta \pm \frac{nh}{dp}.$$

Это обычная формула для дифракции волны длиной $\lambda = h/p$. Необходимо выяснить, происходит ли такая дифракция и при $p \gg \hbar/r_0$. Так как переносимый решеткой импульс равен nh/d, то, как видно из (11), нет никаких оснований сомневаться в существовании дифракции и в справедливости формул теории дифракции, если

$$\frac{nh}{d} \ll \frac{\hbar}{r_0}.$$

При $d \gg 2\pi r_0$ (что соответствует всем решеткам, которые можно изготовить) это условие всегда выполняется для всех низших порядков. При переходе к высшим порядкам наблюдение дифракции становится невозможным из-за преобладания некогерентного излучения, не говоря уже о возможных отклонениях от квантовой механики. Таким образом, можно не сомневаться, что и при импульсах $p \gg \hbar/r_0$, в принципе, вполне наблюдаемы дифракционные явления при почти скользящем падении на решетку, и что они приводят к волне де Бройля $\lambda = h/p$.

Эти соотношения выступают еще более отчетливо, если мы обратимся к рассеянию жесткого γ-излучения на атомных ядрах и выясним вопрос, нельзя ли внутреннюю структуру атомных ядер исследовать таким же способом, каким Дебай исследовал внутреннюю структуру молекул по рассеянию рентгеновских лучей. Перенесем на эту проблему результаты обычной теории рассеяния рентгеновских лучей, не обращая внимания на возможную неприменимость квантовой механики[5].

Согласно этой теории рассеяние распадается на когерентную и некогерентную часть. Амплитуда когерентной части определяется интегралом

$$F = \int dV \rho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{sr}},$$

где $\rho(\mathbf{r})$ — плотность протонов в ядре, $\mathbf{s}$ — импульс, переносимый отдельным γ-квантом, связанный с $\Delta\mathbf{p}$ соотношением $\mathbf{s} = \Delta\mathbf{p}/\hbar$. Таким образом, интенсивность когерентной части при малых углах рассеяния ($\mathbf{s} = 0$) пропорциональна квадрату числа Z протонов в ядре и при равномерном распределении заряда в ядре быстро убывает до нуля в окрестности $\mathbf{s} = 2/R$ (R — радиус ядра). Если распределение заряда неравномерно (т. е. если, например, модель Вефельмейера[6] кристалла из α-частиц дает хорошее приближение), то наблюдаются флуктуации интенсивности когерентного рассеяния, которые надлежит рассматривать, как кольца Дебая—Шеррера, обусловленные интерференцией α-частиц. Если a — расстояние между интерферирующими α-частицами, то соответствующий им максимум лежит в окрестности точки $2\pi/a$. В то же время интенсивность быстро убывает с ростом s, что отчасти объясняется «атомным формфактором» α-частиц. В точке $2/R_\alpha$ (R_α — радиус α-частицы) интенсивность когерентного рассеяния очень мала по сравнению с интенсивностью некогерентного рассеяния (рис. 2).

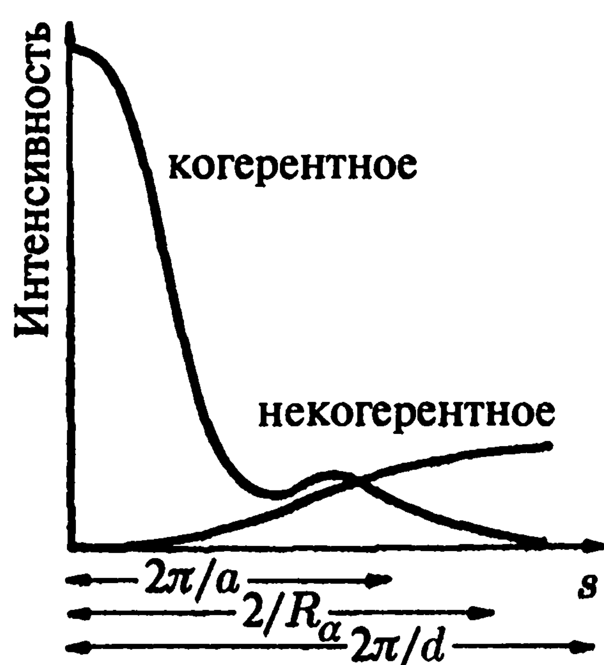


Рис. 2. Рассеяние на атомном ядре

Интенсивность некогерентного рассеяния, наоборот, стремится к нулю при малых углах рассеяния и лишь в окрестности точки $s = 2\pi/d$ (d — среднее расстояние между соседними протонами в ядре) приближается к своему асимптотическому значению, пропорциональному числу протонов Z.

[5] См., например, *Waller B. J.* Zs. Phys., 1928, **51**, 213; *Debye P.* 1930, **31**, 419; *Heisenberg W.* Phys. Rev., 1931, **32**, 738; Erg. techn. Röntgenkunde, 1933, III, 26.

[6] *Wefelmeyer W.* Zs. Phys., 1937, **106**, 332.

Из гипотез I и II следует, что возможные отклонения от квантовой механики лишь несущественно сказываются на отмеченных нами особенностях рассеяния: среднее расстояние между частицами имеет тот же порядок, что и r_0. Отклонения от квантовой механики становятся поэтому заметными лишь при

$$s = \frac{|\Delta, \mathbf{p}|}{\hbar} > \frac{1}{r_0} \sim \frac{1}{d},$$

т. е. главным образом лишь в области, где преобладает некогерентное излучение. Это утверждение справедливо совершенно независимо от импульса падающих квантов света, который может быть очень велик по сравнению с $\hbar/r_0$. Таким образом, измерение структуры атомного ядра по принципу Дебая—Шеррера в принципе должно быть осуществимо, несмотря на то, что квантовая механика непригодна для описания новых явлений, которые встречаются при изменениях импульса $|\Delta\mathbf{p}| > \hbar/r_0$.

Какого рода эти новые явления, мы обсудим в главе 3. Здесь же упомянем лишь о том, что в области $|\Delta\mathbf{p}| > \hbar/r_0$, по-видимому, существенную роль играют процессы множественного рождения частиц, приводящие к возникновению тяжелых электронов. Это означает, что вместо некогерентного рассеяния на передний план выступают другие некогерентные процессы, которые (так же, как и обычное некогерентное рассеяние) не мешают наблюдать интерференцию α-частиц.

§3

В заключение кратко обсудим тормозное излучение, рождение пар частиц и эффект Комптона. Как показали работы Вильямса[7] и Вайцзеккера[8], в двух первых явлениях все существенные вклады в формулы Бете и Гайтлера обусловлены процессами, при которых выполняется неравенство (11) и, следовательно, нельзя ожидать отклонений от квантовомеханических законов. И действительно, квантовомеханические утверждения относительно этих процессов, приводящих к возникновению каскадов, вплоть до очень высоких энергий сталкивающихся частиц подтверждаются экспериментально.

В случае эффекта Комптона частота кванта света, рассеянного на угол θ, изменяется по известной формуле

$$\frac{1}{\nu'} = \frac{1}{\nu} + \frac{h}{mc^2}(1 - \cos\theta).$$

Для проверки неравенства (11) мы получаем соотношение

$$(\mathbf{p}_{\rm I} - \mathbf{p}_{\rm II})^2 - (p^0_{\rm I} - p^0_{\rm II})^2 = \frac{h\nu}{c}\frac{h\nu'}{c}(1 - \cos\theta) = \left(\frac{h\nu}{c}\right)^2 \frac{1 - \cos\theta}{1 + \dfrac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos\theta)}.$$

Таким образом, из неравенства (11) следует, что квантовая механика применима, если

$$\frac{h\nu}{c} mc \ll \left(\frac{\hbar}{r_0}\right)^2. \tag{13}$$

Намного раньше это условие вывел из аналогичных соображений Нильс Бор[9].

---

[7] *Williams C. J.* Proc. Roy. Soc., London, 1933, (A) 139, 163.

[8] *Weizsäcker C. F. von.* Zs. Phys., 1934, **88**, 612.

[9] *Bohr N.* Konferenz über Kernphysik in Rom, 1931, S. 119. В трудах Солвеевской конференции 1933 г. Бор в дополнении к сообщению Ландау заметил, что неприменимости формулы Клейна—Нишины

III

ПРОЦЕССЫ, НЕ РАССМАТРИВАЕМЫЕ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Физические явления, описываемые современной теорией, не принято рассматривать после того, как достигается неравенство (12), так как тогда с их описанием справляется квантовая механика. Тем не менее, как было показано ранее, теория β-распада позволяет выработать определенную точку зрения на эти явления. Из теории β-распада, предложенной Ферми, следует качественный вывод о том, что при столкновении частиц с высокой энергией происходят взрывы, т. е. за один акт рождается много вторичных частиц[10]. Если теорию Ферми заменить теорией Юкавы[11], которая стала весьма вероятной после открытия тяжелых электронов, то в скалярном варианте теории возникновение процессов множественного рождения будет зависеть от значений постоянной $g^2/\hbar c$[12]. Юкава и другие авторы[13] показали, что векторный вариант теории, как и теория Ферми, приводит к взрывам, если энергия сталкивающихся частиц достаточно велика. По теории Юкавы взрывы сопровождаются рождением главным образом тяжелых электронов, протонов и нейтронов. Рождение квантов света и легких нейтронов по теории Юкавы происходят реже соответственно в $\sim e^2/\hbar c$ и $\sim (e^2/\hbar c)^2$ раз. Эти следствия из теории, по-видимому, в какой-то мере находят экспериментальное подтверждение[14].

Теория Юкавы приводит также к особенно простой и естественной интерпретации условий (11) и (12), устанавливающих границы применимости квантовой механики. Характерное условие может выполняться в виде неравенства

$$(p_{\rm I}^0 - p_{\rm II}^0) - (\mathbf{p}_{\rm I} - \mathbf{p}_{\rm II}) > \left(\frac{\hbar}{r_0}\right)^2 \qquad (12а)$$

лишь при рождении частиц с массой покоя больше $\hbar/r_0 c$, т. е. при рождении либо одной частицы Юкавы, либо одного протона, либо одного нейтрона. То же условие с противоположным знаком неравенства

$$(\mathbf{p}_{\rm I} - \mathbf{p}_{\rm II})^2 - (p_{\rm I}^0 - p_{\rm II}^0)^2 > \left(\frac{\hbar}{r_0}\right)^2 \qquad (12б)$$

означает изменение импульса и энергии частицы с определенной массой покоя, столь большой, что при совпадении двух или более таких изменений энергии–импульса (участии в процессе двух или большего числа частиц) энергии и импульса

следовало бы ожидать при меньших частотах, если уточнить, при каких частотах в классической теории электронов силы излучения превалируют над силами инерции. Но классическая теория излучения неприменима к проблеме светового излучения при высоких частотах, а в рамках квантовой теории излучения невозможно говорить о превалировании сил излучения при всех энергиях, допускаемых неравенством (13).

[10] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1936, **101**, 533.

[11] *Yukawa H.* Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1935, **17**, 48; *Yukawa H., Sakata S.* Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1937, **19**, 1044; *Oppenheimer J. R., Serber R.* Phys. Rev., 1937, **51**, 1113; *Stükelberg E. C.* Phys. Rev., 1937, **52**, 42; *Kemmer N.* Nature, 1938, **141**, 116; *Bhabba H.* Nature, 1938, **141**, 117; Proc. London Soc., 1938, (A) 164, 257; *Frölich E., Heitler W., Kemmer N.* Proc. Roy. Soc., 1938, (A) 166, 154; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc., 1938, (A) 166, 529.

[12] *Yukawa H., Sakata S.* Ann. Phys., 1938, **32**, 20; *Wentzel G.* Naturwiss., 1938, **26**, 273.

[13] *Yukawa H.* Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1935, **17**, 48; *Yukawa H., Sakata S.* Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1937, **19**, 1044; *Oppenheimer J. R., Serber R.* Phys. Rev., 1937, **51**, 1113; *Stükelberg E. C.* Phys. Rev., 1937, **52**, 42; *Kemmer N.* Nature, 1938, **141**, 116; *Bhabba H.* Nature, 1938, **141**, 117; Proc. London Soc., 1938, (A) 164, 257; *Frölich E., Heitler W., Kemmer N.* Proc. Roy. Soc., 1938, (A) 166, 154; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc., 1938, (A) 166, 529.

[14] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382.

оказывается достаточно для рождения одной или нескольких частиц Юкавы. Это позволяет предположить еще одну неточную формулировку гипотезы I: квантовая механика неприменима (не дает надежные количественные результаты) ко всем процессам, в которых количество передаваемой энергии и передаваемый импульс достаточно велики для того, чтобы процесс приводил к рождению частиц Юкавы. При достаточно большом запасе энергии один акт может привести к рождению многих тяжелых электронов (и, возможно, протонов и нейтронов).

В этой связи заслуживает обсуждения вопрос о том, в какой мере заслуживает доверия обменный потенциал Юкавы двух частиц

$$J(r) = g^2 \frac{e^{-\varkappa r}}{r} \qquad \left(\varkappa \sim \frac{1}{r_0}\right). \tag{14}$$

Если перейти из координатного пространства в импульсное, то матричный элемент, соответствующий переданному импульсу p, будет иметь вид:

$$J(p) = \int \frac{d\mathbf{r}}{h^3} J(r) e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} = \frac{g^2}{\pi h} \frac{1}{p^2 + (\varkappa\hbar)^2}. \tag{15}$$

Согласно неравенству (11), такой матричный элемент заслуживал бы доверия лишь при $p \ll \hbar/r_0 \sim \varkappa\hbar$, т. е., если сравнить с (15), лишь при передаче малых импульсов, от которых матричный элемент еще не зависит. Вычисления при этом можно проводить на основе квантовой механики с возможной ошибкой порядка $pr_0/\hbar$. Но в области $p \ll \hbar/r_0$ потенциал (14), не изменяя существенно результат, можно заменить потенциалом, имеющим форму прямоугольной ямы или колоколообразной кривой. Ввиду этого представляется сомнительным, чтобы уточненные расчеты дефекта массы с потенциалом (14) приводили к лучшим результатам, чем прежние расчеты. Более того, приведенные нами соображения наводят на мысль, что граница применимости квантовой механики к рассмотрению атомного ядра проходит там, где возникает необходимость в уточнении вида потенциала по сравнению с простейшими потенциалами типа прямоугольной ямы или колоколообразной кривой. По-видимому, такое уточнение возможно только в теории, существенно выходящей за рамки квантовой механики, так как в описываемой теорией области выполняется неравенство (12).

Уточненная теория должна давать алгоритм вычисления массы покоя элементарных частиц, так как более точные утверждения о процессах, параметры которых удовлетворяют условию (12), приводят к более точным утверждениям относительно собственной энергии частиц, т. е. относительно их массы покоя. В формализме квантовой теории (глава 1) механизмы множественного рождения, возникающие, как показывают эксперименты в космических лучах при высоких энергиях, приходится учитывать при помощи членов, имеющих точно такой же вид, как и члены, описывающие собственные энергии. Это свидетельствует о том, что проблема процессов множественного рождения вряд ли отделима от определения масс элементарных частиц.

О СПЕКТРЕ ВОДОРОДА С ТОЧКИ ЗРЕНИЯ НОВОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ*

В. Паули мл.

Показывается, что из новой квантовой механики получаются правильные термы Бальмера для атома с одним единственным электроном, и что в новой теории исчезают возникавшие в старой теории из-за дополнительного запрета сингулярных движений трудности, которые проявляются в особенности в случае скрещенных полей. С точки зрения новой квантовой механики обсуждается также влияние внешних электрических и магнитных полей на спектр водорода. Однако учет релятивистских поправок и расчет вероятностей перехода (интенсивностей) пока еще не производится.

§1
Основы новой квантовой механики

Недавно Гейзенбергом[1)] была дана формулировка принципов квантовой теории, означающая большой шаг вперед по сравнению с существовавшей до сих пор теорией многократно периодических систем. В соответствии с указанной гейзенберговской формулировкой квантовой теории провозглашается полный отказ от наглядных механико-кинематических представлений о движении электронов в стационарных состояниях атома и вводятся, кроме усредненных по времени классических кинематических величин, только гармонические парциальные колебания, которые сопоставляются каждому переходу между двумя стационарными состояниями и которые находятся в непосредственной связи с вероятностями спонтанных переходов системы. Если

$$x_m^n = a_m^n e^{2\pi i(\nu_m^n t + \delta_m^n)}$$

означает соответствующее переходу из некоторого состояния n в другое состояние m парциальное колебание вдоль декартовой координаты x некоторого определенного электрона в атоме, то вклад его в значение коэффициента вероятности спонтанного излучения A_m^n при рассматриваемом переходе будет

$$\frac{1}{h\nu_m^n}\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}(2\pi\nu_m^n)^4|x_m^n|^2\cdot 2.$$

Если в прежней теории это соотношение в согласии с принципом соответствия следовало считать верным только асимптотически, в предельном случае больших квантовых чисел, то отныне оно должно рассматриваться как всегда справедливое определение амплитуд x_m^n; в более общем случае парциальные колебания, сопоставляемые отдельным процессам перехода, физически определяются интенсивностью

---

* Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik. (Von *W. Pauli jr.*). — Zs. Phys., 1926, **36**, 336–363. *Перевод А. А. Сазыкина.*

1) *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **33**, 879. — Русский перевод: с. 86–98.

и поляризацией испущенного излучения. Однако эти парциальные колебания уже нельзя относить к определенным «орбитам» электронов в атоме, так как они сопоставляются процессам перехода, а не стационарным состояниям.

Формулировка квантовой теории, данная Гейзенбергом, была затем развита дальше Борном и Иорданом[2)], Дираком[3)], а также Борном, Иорданом и Гейзенбергом[4)] в последовательную математическую систему, в которой все соотношения, взятые ранее из классической механики, заменяются аналогично образованными квантовотеоретическими соотношениями между усредненными по времени значениями координат отдельных атомных частиц x_n^n и парциальных колебаний x_m^n. Для того, чтобы сформулировать эти соотношения, оказалось целесообразным каждой классической кинематической величине x сопоставить матрицу; на ее диагонали располагаются усредненные по времени значения x_n^n, принадлежащие отдельным стационарным состояниям, на местах (n, m) (n-я строка, m-й столбец) и (m, n) (m-я строка, n-й столбец) находятся комплексно сопряженные колебания

$$x_m^n = a_m^n e^{2\pi i(\nu_m^n t+\delta_m^n)}; \quad x_n^m = a_n^m e^{2\pi i(\nu_n^m t+\delta_n^m)}, \tag{1}$$

причем $a_m^n = a_n^m$ суть положительные вещественные величины и

$$\nu_n^m = -\nu_m^n, \quad \delta_n^m = -\delta_m^n. \tag{2}$$

Гармоническое колебание x_n^m принадлежит переходу из m в n, гармоническое колебание x_m^n — обратному переходу из n в m, так что один из этих переходов отвечает излучению, другой — поглощению.

Производной по времени $\dot{x}$ сопоставляется матрица, отдельные элементы которой образуются путем дифференцирования по времени соответствующих элементов матрицы x, так что

$$\dot{x}_m^n = 2\pi i \nu_m^n x_m^n. \tag{3}$$

В частности, $\dot{x}_n^n = 0$, т. е. диагональные элементы $\dot{x}$ обращаются в нуль. Вследствие условия $\nu_n^m = -\nu_m^n$ здесь также оказывается, что элементы $\dot{x}_m^n = 0$ и $\dot{x}_n^m = 0$ комплексно сопряжены (эрмитовость матриц). Энергии E сопоставляется диагональная матрица, т. е. такая матрица, недиагональные элементы которой равны нулю. Элемент $E_n = E_n^n$ означает собственное значение энергии квантового состояния, отмеченного индексом n, и вследствие условия частот мы имеем

$$h\nu_m^n = E_n^n - E_m^m, \tag{I}$$

что согласуется с приведенными выше условиями $\nu_n^m = -\nu_m^n$, $\nu_n^n = 0$.

Существенно теперь то подчеркнутое Гейзенбергом обстоятельство, что умножение двух матриц x и y с учетом условия частот приобретает смысл. Произведение xy двух матриц x и y определяется равенством

$$(xy)_m^n = \sum_l x_l^n y_m^l. \tag{4}$$

Поскольку из условия (1) вытекает комбинационное соотношение

$$\nu_l^n + \nu_m^l = \nu_m^n, \tag{5}$$

[2)] *Born H., Jordan P.* Zs. Phys., 1925, **34**, 858.

[3)] *Dirac P. A. M.* Proc. Roy. Soc. London, 1925, **A 109**, 642.

[4)] *Born M., Jordan P., Heisenberg W.* Zs. Phys., 1925, **35**, 557. — Русский перевод: с. 127–175. В дальнейшем цитируется как «Квантовая механика II».

элемент $(xy)^n_m$ в действительности изображает снова гармоническое колебание частотой ν^n_m, если x^n_l и y^l_m суть гармонические колебания с частотами ν^n_l и ν^l_m. Тогда и для фаз δ^n_m должно быть принято комбинационное соотношение

$$\delta^n_l + \delta^l_m = \delta^n_m. \qquad (6)$$

Для умножения двух матриц выполняются все обычные правила вычислений за исключением закона коммутативности; произведения xy и yx в общем случае различны. Так, например, разность Ex − xE, в которой E означает диагональную матрицу энергии, а произведения вычисляются по общему правилу (4), в соответствии с формулой (3) и условием частот (I) может быть поставлена в простую связь с матрицей $\dot{\mathrm{x}}$, изображающей производную матрицы x по времени:

$$\mathrm{Ex} - \mathrm{xE} = \frac{h}{2\pi i}\dot{\mathrm{x}}. \qquad (7)$$

Это соотношение выполняется для произвольной матрицы x. Соотношения, необходимые для вычисления матриц x некоторой заданной механической системы, физические основные законы новой квантовой механики Борн и Иордан привели к следующей форме, которую мы сейчас изложим для систем с произвольным числом степеней свободы. Пусть символы q_ρ и p_ρ $(\rho = 1 \dots f)$ обозначают декартовы координаты атомных частиц и сопряженные им импульсы $(\mathrm{p}_x = m\dot{\mathrm{x}})$. Тогда помимо условия частот (1) выполняются «квантовые условия»

$$\begin{gathered}\mathrm{p}_\rho \mathrm{p}_\sigma - \mathrm{p}_\sigma \mathrm{p}_\rho = 0, \quad \mathrm{q}_\rho \mathrm{q}_\sigma - \mathrm{q}_\sigma \mathrm{q}_\rho = 0, \\ \mathrm{p}_\rho \mathrm{q}_\sigma - \mathrm{q}_\sigma \mathrm{p}_\rho = \begin{cases} 0 & \text{при} \quad \rho \neq \sigma, \\ \frac{h}{2\pi i}\cdot 1 & \text{при} \quad \rho = \sigma. \end{cases}\end{gathered} \qquad \mathrm{(II)}$$

Здесь 1 означает «единичную матрицу» (у которой недиагональные элементы обращаются в нуль, а диагональные элементы равны 1). Как показал Крамерс[5], эти соотношения можно интерпретировать на основе квантовотеоретических дисперсионных формул Ладенбурга, Крамерса, а также Крамерса и Гейзенберга с помощью требования, чтобы по отношению к короткопериодическим внешним силам индивидуальные атомные частицы вели себя как свободные частицы. Наконец, в качестве последнего квантового закона действует закон сохранения энергии

$$\mathrm{H}(\mathrm{p},\mathrm{q}) = \mathrm{E} \quad \text{(диагональная матрица)}. \qquad \mathrm{(III)}$$

Матричная функция H(p, q) характеризует определенную механическую систему, и наиболее естественное предположение заключается в том, что для декартовых координат она формально совпадает с классической функцией. Мы можем ограничиться случаем, когда она состоит из соответствующих кинетической и потенциальной энергии двух частей, из которых одна зависит только от p, вторая — только от q. Прежде всего в соответствии с правилом умножения (4) определяются только такие матричные функции, которые могут быть представлены в виде разложения в степенные ряды относительно p и q. Для этого случая Борн, Иордан и Гейзенберг показали, что из основных законов (I), (II) и (III) следуют только такие матричные соотношения, которые оказываются полностью аналогичными уравнениям движения классической механики и которые при соответствующем определении частных производных в правой части могут быть написаны в виде

$$\dot{\mathrm{q}}_\rho = \frac{\partial \mathrm{H}(\mathrm{p},\mathrm{q})}{\partial \mathrm{p}_\rho}, \quad \dot{\mathrm{p}}_\rho = \frac{\partial \mathrm{H}(\mathrm{p},\mathrm{q})}{\partial \mathrm{q}_\rho}. \qquad (8)$$

[5] *Kramers H.A.* Physica, 1925, **5**, 369.

Следует еще подчеркнуть, что последовательность, в которой располагаются матрицы стационарных состояний рассматриваемой системы, оказывается несущественной и что в новой теории понятие «квантовое число» не входит в основные законы. Далее, в противоположность прежней теории, в новой теории значения вероятностей перехода в принципе количественно определяются и для малых квантовых чисел.

§2
Общий обзор методов и результатов дальнейших вычислений

В данной работе мы поставили перед собой задачу применить новую теорию к атому с одним единственным электроном. Однако нам еще не удалось получить из основных законов новой теории все выводы, относящиеся к такому водородоподобному атому; в частности, мы еще не пытались рассчитать вероятности перехода для водородоподобных спектров, а проделали только вычисление значений энергий стационарных состояний атома водорода как в отсутствие возмущений, так и в присутствии внешних электрических и магнитных полей (исключая вероятности перехода). Релятивистские поправки пока не рассматривались. В результате получены бальмеровские термы и эффект Штарка в согласии с опытом. Кроме того, отпали трудности, возникавшие в прежней теории вследствие дополнительных запретов сингулярных движений, в которых электрон подходит к ядру как угодно близко, и становившиеся особенно заметными в случае скрещенных электрических и магнитных полей. Эти трудности мы разъясним сейчас подробнее.

Рассмотрим сначала случай параллельных электрических и магнитных полей. Если e и m_0 означает заряд и массу электрона, Ze — заряд ядра, a — полуось орбиты, F и H — напряженности электрического и магнитного полей, то частота Лармора равна

$$o_h = \frac{eH}{4\pi m_0 c}, \tag{9}$$

вековая частота эффекта Штарка o_F дается формулой

$$o_F = \frac{3}{4\pi}\sqrt{\frac{a}{Zm_0}}F = \frac{3}{2}eF\frac{a_1}{h}n, \tag{10}$$

где

$$a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 Ze^2 m_0}$$

означает радиус одноквантовой круговой орбиты в атоме. В поле добавляются затем два квантовых условия, определяющие проекцию z расстояния электрического центра орбиты от ядра на направление поля по формуле

$$z = \frac{3}{2}a\frac{s}{n} \tag{11}$$

и момент импульса P_z, параллельный полю

$$P_z = m\frac{h}{2\pi}. \tag{12}$$

При этом для заданных n и $|m| \leqslant n$ квантовое число эффекта Штарка s, если сначала отвлечься от дополнительных запретов, пробегает значения, симметричные

относительно нуля и расположенные последовательно с шагом в две единицы[6)]

$$s = -(n - |m|),\ -(n - |m| - 2),\ \ldots,\ (n - |m| - 2),\ n - |m|, \quad \text{причем } |m| \leqslant n. \tag{13}$$

Дополнительная энергия в поле определяется тогда по формуле

$$F_1 = (so_F + mo_H)h. \tag{14}$$

Для обобщения на случай скрещенных полей целесообразно вместо o_F и o_H ввести частоты

$$\omega_1 = o_H + o_F, \quad \omega_2 = |o_H - o_F|.$$

Тогда формулы (13) и (14) будут равнозначны соотношению

$$E_1 = \left(\frac{n}{2} - n_1\right)\omega_1 h + \left(\frac{n}{2} - n_2\right)\omega_2 h, \tag{15}$$

где

$$0 \leqslant n_1 \leqslant n, \quad 0 \leqslant n_2 \leqslant n. \tag{16}$$

Поскольку ω_1 и ω_1 определяются всегда как положительные величины, так что

$$\omega_2 = o_H - o_F, \quad o_H > o_F,$$
$$\omega_2 = o_F - o_H, \quad o_F > o_H,$$

то связь чисел s и m с числами n_1 и n_2 имеет вид

$$\begin{cases} m = n - (n_1 + n_2), & s = n_2 - n_1 \quad \text{при} \quad o_H > o_F, \\ m = n_2 - n_1, & s = n - (n_1 + n_2) \quad \text{при} \quad o_H < o_F. \end{cases} \tag{17}$$

Для случая $o_H = o_F$ мы получаем $\omega_2 = 0$, и система оказывается вырожденной.

В общем случае скрещенных электрических и магнитных полей в соответствии с результатами Клейна[7)] и Ленца[8)] выражение (15) для энергии возмущения квантовых состояний системы остается в силе, если частоты ω_1 и ω_2 определяются следующим образом. Пусть $\mathfrak{o}_F$ и $\mathfrak{o}_H$ теперь будут *векторы*, параллельные внешнему электрическому или магнитному полю, причем абсолютная величина векторов совпадает с вековой частотой (10) или (9), которая была бы обусловлена каждым из этих полей в отдельности. Теперь мы сложим и вычтем $\mathfrak{o}_F$ и $\mathfrak{o}_H$ *векторно* и образуем абсолютные величины результирующих векторов. Тогда мы получим

$$\omega_1 = |\mathfrak{o}_H + \mathfrak{o}_F|, \quad \omega_2 = |\mathfrak{o}_H - \mathfrak{o}_F|. \tag{18}$$

Для параллельных электрических и магнитных полей это согласуется с прежним правилом.

[6)] Это следует, между прочим, из связи s и n с квантовыми числами n_ξ, n_η для параболических координат ξ, η по формулам

$$n = n_\xi + n_\eta + |m|, \quad s = n_\xi - n_\eta,$$
$$0 \leqslant n_\xi \leqslant n, \quad 0 \leqslant n_\eta \leqslant n.$$

[7)] *Klein O.* Zs. Phys., 1924, **22**, 109.

[8)] *Lenz W.* Zs. Phys., 1924, **24**, 197. Числа n_1 и n_2, определенные в этой работе, при нечетных n не являются целыми, а пробегают (если мы придерживаемся квантовых правил для периодических систем), с шагом, равным единице, значения от $-\frac{n}{2}$ до $\frac{n}{2}$, включая границы.

Однако этот результат приводит к значительным трудностям, когда мы будем связывать его с исключением тех орбит, на которых электрон падает на ядро или подходит к нему как угодно близко в процессе своего движения. Первый дополнительный запрет такого рода появился уже в теории релятивистской тонкой структуры Зоммерфельда, где состояния с исчезающим квантовым числом импульса k, в которых электрон колебался бы вдоль проходящей через ядро прямой, должны были исключаться как не относящиеся к стационарным состояниям:

$$k \neq 0. \tag{19}$$

В случае эффекта Штарка значение числа эффекта Штарка $|s| = n$ также соответствует таким прямолинейным маятниковым орбитам, и можно считать эмпирически установленным, что в действительности оно не реализуется:

$$|s| \neq n. \tag{20}$$

Вообще, сравнивая количество стационарных состояний релятивистской тонкой структуры в слабых осесимметричных силовых полях и при эффекте Штарка, Бор показал, что вследствие дополнительного запрета (19) в осесимметричных силовых полях всегда должны исключаться также все орбиты с $m = 0$, на которых, впрочем, при эффекте Штарка электрон неограниченно приближался бы к ядру:

$$m \neq 0. \tag{20$'$}$$

Условие (20) содержится в (20′) в качестве частного случая, так как в соответствии с формулами (13) при $s = n$ число m может быть только нулем. В скрещенных же полях оказывается возможным непрерывный переход разрешенных для стационарных состояний орбит в запрещенные условием (20) или (20′) орбиты. Для этого нужно реализовать лишь следующий адиабатический процесс. Сначала оба поля пусть будут параллельными, а o_H и o_F — различными, например, $o_h > o_F$. После того как направления полей относительно друг друга будут медленно повернуты, мы будем уменьшать интенсивность магнитного поля до тех пор, пока $|o_H|$ не станет меньше $|o_F|$; наконец, мы направим оба поля опять параллельно. В этом процессе в соответствии с формулами (18) ω_1 и ω_2 всегда будут отличны от нуля, и потому квантовые числа n_1 и n_2 будут всегда сохранять одно и то же значение. Но так как перед процессом было $o_H > o_F$, а после процесса стало $o_H < o_F$, то вследствие формул (17) результатом процесса будет то, что будут переведены друг в друга такие состояния, в которых *электрическое квантовое число s и магнитное квантовое число m взаимно обмениваются своими значениями.* В частности, маятниковая орбита $s = n$, $m = 0$ будет переведена в круговую орбиту $s = 0$, $m = n$, расположенную перпендикулярно полю. Итак, выясняется, что дополнительные запреты, в силу которых прямолинейные маятниковые орбиты должны исключаться, не могут быть выполнены без противоречий в пределах квантовой теории многократно периодических систем.

Между тем вычисление, которое будет выполнено дальше (§ 5), показывает, что в новой квантовой механике, в которой не вводятся наглядные представления стационарных состояний с помощью определенных орбит электронов, особые дополнительные запреты становятся излишними, и указанные выше трудности исчезают сами собой. Именно, для n-квантового состояния невозмущенного атома с энергией (R — постоянная Ридберга)

$$E_n = -\frac{RhZ^2}{n^2} \tag{21}$$

для дополнительной энергии во внешних параллельных или скрещенных электрических и магнитных полях получаются снова значения (14) и (15), причем o_H и o_F определяются снова по формулам (9) и (10), а ω_1 и ω_2 — по формулам (18). Однако в формулах (13), (16) и (17) в соответствии с новой механикой n всегда следует заменять на

$$n^* = n - 1. \tag{22}$$

Это число теперь всегда равно максимальному из значений s, m и n_1, n_2, так что отныне мы имеем

$$s = -(n^* - |m|),\ \ -(n^* - |m| - 2),\ \ \ldots,\ \ (n^* - |m| - 2), n^* - |m|, \quad \text{при } |m| \leqslant n^*, \tag{13*}$$

$$0 \leqslant n_1 \leqslant n^*, \quad 0 \leqslant n_2 \leqslant n^*, \tag{16*}$$

$$\begin{cases} m = n^* - (n_1 + n_2), & s = n_2 - n_1 \quad \text{при} \quad o_H > o_F, \\ m = n_2 - n_1, & s = n^* - (n_1 + n_2) \quad \text{при} \quad o_H < o_F. \end{cases} \tag{17*}$$

В частности, для эффекта Штарка в соответствии с формулами (10) и (14) получается

$$E_1 = \frac{3}{2} eFa_1 ns \quad \text{при} \quad 0 \leqslant s \leqslant n^*, \tag{23}$$

как требует опыт. Далее, мы видим, что множество значений чисел m и s теперь полностью симметрично, как этого требует указанный адиабатический процесс в скрещенных полях.

При снятии вырождения невозмущенного атома под влиянием дополнительного центрально-силового поля (например, создаваемого релятивистскими поправками) и внешнего магнитного поля n-квантовое состояние атома с энергией (21) в соответствии с новой квантовой механикой расщепляется на состояния, которые могут быть классифицированы по числам k и m, удовлетворяющим известным правилам отбора

$$\Delta k = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1.$$

Целое число m в соответствии с формулой (12) снова определяет параллельную полю компоненту импульса атома, тогда как значение числа k, определяемого энергией возмущения центрального поля, не имеет такого непосредственного динамического смысла. Для n-квантового состояния оно принимает $n - 1$ последовательных значений, отличающихся на единицу, так что во всяком случае получается правильное количество уровней тонкой структуры без введения дополнительных запретов (о значений энергии этих уровней пока ничего сказать нельзя). Мы будем нормировать число k таким образом, чтобы во внешнем магнитном поле квантовое число m для каждого состояния, характеризуемого числами n и k, принимало (целочисленные) значения

$$-k \leqslant m \leqslant k. \tag{24}$$

Нормированное таким образом число k в n-квантовом состоянии может принимать значения

$$k = 0, 1, 2, \ldots, n^*. \tag{25}$$

Между состояниями, классифицируемыми по правилам (24), (25) и (13*), может быть установлено однозначное соответствие. Статистический вес n-квантового состояния (в каждом случае) равен n^2.

Указанные свойства получаемого из новой теории множества термов атома водорода во внешних полях приводят, в частности, к выводу, что в нормальном

состоянии этого атома, в котором $n = 1$, $n^* = 0$, квантовое число m не может принимать никакого иного значения, кроме $m = 0$, т. е. это состояние немагнитное. Этот вывод может показаться по аналогии со свойствами щелочных металлов особенно странным. В связи с этим следует подчеркнуть, что теперешняя формулировка новой квантовой механики, по-видимому, еще не может объяснить аномальный эффект Зеемана (нарушение теоремы Лармора), и что поэтому могут еще понадобиться ее видоизменения. По-видимому, не исключено, что эти видоизменения теории будут сделаны уже для атомов с одним единственным электроном. К этим вопросам мы еще вернемся в конце этой работы (§ 6).

Что касается применяемого дальше метода решения матричных уравнений новой теории в случае атома с одним электроном, то, прежде всего, в § 3 будут развиты правила вычислений, необходимые при одновременных действиях с матрицами x, y, z декартовых координат электрона (объединенных в одну векторную матрицу $\mathfrak{r}$) и матрицей r абсолютной величины радиус-вектора, а также с их производными по времени. Известная теперь формулировка законов новой квантовой механики заставляет нас избегать введения полярного угла φ. Поскольку этот угол не остается внутри конечной ограниченной области, он не может быть формально представлен в матричном виде, как указанные выше координаты, которые в классической механике совершают колебания.

Именно по этой причине особенно подходящим для перенесения в новую квантовую механику оказывается следующий специальный метод интегрирования для случая кулоновских сил, который был применен уже Ленцем[9]. Если мы введем обозначение для постоянного во времени момента импульса электрона относительно ядра

$$\mathfrak{P} = m_0[\mathfrak{r}\mathfrak{v}] \tag{26}$$

и для его импульса

$$\mathfrak{p} = m_0\mathfrak{v},$$

то из уравнений движения классической механики можно непосредственно показать, что вектор

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{Ze^2m_0}[\mathfrak{P}\mathfrak{p}] + \frac{\mathfrak{r}}{r} \tag{27}$$

будет постоянен во времени. Умножая его скалярно на $\mathfrak{r}$, мы получаем

$$(\mathfrak{A}\mathfrak{r}) = -\frac{1}{Ze^2m_0}\mathfrak{P}^2 + r. \tag{28}$$

Это уравнение конического сечения, и из него можно видеть, что вектор $\mathfrak{A}$ имеет направление от ядра к афелию эллипса, а по абсолютной величине совпадает с его числовым эксцентриситетом. Возводя обе части равенства (27) в квадрат, мы получаем

$$1 - \mathfrak{A}^2 = \frac{2E}{m_0Z^2e^4}\mathfrak{P}^2, \tag{29}$$

где E означает энергию.

В § 4 будет показано, что и в новой механике по аналогии с формулой (27) можно ввести постоянную во времени векторную матрицу $\mathfrak{A}$, для которой вместе с также постоянной во времени векторной матрицей момента импульса $\mathfrak{P}$ выполняются соотношения, аналогичные формулам (28) и (29). Присоединяя еще

[9] *Lenz W.* Op. cit.

свойственные новой механике квантовые условия (II) и развитые в § 3 соотношения, мы получаем систему матричных уравнений, в которые входят уже только постоянные во времени матрицы $\mathfrak{U}$, $\mathfrak{P}$ и E, а координаты (т. е. вероятности перехода) из них исключены. Решение этих последних уравнений, которое получается элементарными методами (§ 5), дает затем уже обсуждавшиеся выше результаты.

§ 3

Правила действий с матрицей радиус-вектора. Закон сохранения импульса для центральных сил

Мы начнем с того, что установим правила одновременных действий с матрицами декартовых координат x, y, z, образующих компоненты векторной матрицы $\mathfrak{r}$, и с матрицей абсолютной величины радиус-вектора r. Последняя матрица должна, очевидно, удовлетворять соотношению

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2. \tag{30}$$

Квантовые условия (II) содержат наряду с перестановочностью матриц x и y, x и $\dot{y}$, $\dot{x}$ и $\dot{y}$ (и соответственно для остальных координат)

$$xy = yx, \dots; \quad x\dot{y} = \dot{y}x, \dots; \quad \dot{x}\dot{y} = \dot{y}\dot{x}, \dots \tag{31a}$$

еще соотношения

$$p_x x - x p_x = \frac{h}{2\pi i} \cdot 1, \dots . \tag{31б}$$

(Здесь $p_x = m\dot{x}$ означает x-компоненту импульса $\mathfrak{p} = m\mathfrak{v}$, изображаемого векторной матрицей с компонентами p_x, p_y, p_z.) Здесь и в дальнейшем многоточие (...) будет всегда указывать на справедливость для остальных координат аналогичных уравнений, получаемых из написанного уравнения циклической перестановкой координат.

С привлечением матрицы r эти условия можно дополнить следующими добавочными соотношениями. Во-первых, матрица r также коммутирует с матрицами x, y, z, что можно написать в виде векторного уравнения

$$r\mathfrak{r} = \mathfrak{r}r. \tag{32}$$

Во-вторых, для любой рациональной функции f от матриц r, x, y, z выполняется соотношение

$$p_x f - f p_x = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial f}{\partial x}, \dots . \tag{33}$$

В частности, для f = r имеем

$$\mathfrak{p}r - r\mathfrak{p} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\mathfrak{r}}{r}. \tag{34}$$

Наоборот, из формул (31) и (34) для всякой функции, представимой в виде разложения в ряд по положительным и отрицательным степеням матриц x, y, z и r, в общем случае следует соотношение (33), как легко показать методом полной индукции; соотношение (34) согласуется также с соотношением (30). Существование соотношений (32) и (33) необходимо требуется для того, чтобы из закона сохранения энергии (мы предполагаем здесь для простоты, что имеется только одна единственная частица)

$$\frac{m\mathfrak{v}^2}{2} + F(x, y, z, r) = E \quad \text{(диагональная матрица)} \tag{35}$$

и из условия частоты, которое имеет следствием для каждой величины Φ уравнение

$$\mathrm{E}\Phi - \Phi\mathrm{E} = \frac{h}{2\pi i}\dot{\Phi},$$

получались уравнения движения

$$\frac{d\mathrm{p}_x}{dt} = -\frac{\partial \mathrm{F}}{\partial \mathrm{x}}, \ldots . \tag{36}$$

Таким образом, мы постулируем здесь существование матрицы r, удовлетворяющей соотношениям (30), (32) и (34).

Теперь мы введем векторную матрицу $\mathfrak{P}$, соответствующую моменту импульса частицы относительно начала координат. Прежде всего заметим, что далее мы будем понимать под скалярным произведением двух векторных матриц $\mathfrak{U}$ и $\mathfrak{B}$ как в обычном векторном исчислении, выражение

$$(\mathfrak{U}\mathfrak{B}) = \mathfrak{U}_x\mathfrak{B}_x + \mathfrak{U}_y\mathfrak{B}_y + \mathfrak{U}_z\mathfrak{B}_z,$$

под их векторным произведением $[\mathfrak{U}\mathfrak{B}]$ новую векторную матрицу с компонентами

$$[\mathfrak{U}\mathfrak{B}]_x = \mathfrak{U}_y\mathfrak{B}_z - \mathfrak{U}_z\mathfrak{B}_y. \tag{37}$$

В общем случае здесь надо учитывать последовательность умножения матриц $\mathfrak{U}$ и $\mathfrak{B}$: выражения $(\mathfrak{U}\mathfrak{B}) - (\mathfrak{B}\mathfrak{U})$ и $[\mathfrak{U}\mathfrak{B}] + [\mathfrak{B}\mathfrak{U}]$ не всегда обращаются в нуль, так как закон коммутативности умножения здесь не действует, векторное произведение $[\mathfrak{U}\mathfrak{U}]$ матрицы $\mathfrak{U}$ на саму себя с компонентами

$$[\mathfrak{U}\mathfrak{U}]_x = \mathfrak{U}_y\mathfrak{U}_z - \mathfrak{U}_z\mathfrak{U}_y \tag{37'}$$

в общем случае также отличается от нуля. Однако, если мы образуем в частном случае векторное произведение $[\mathfrak{r}\mathfrak{v}]$, то вследствие коммутативности x и $\dot{\mathrm{y}}$ оно будет совпадать с $-[\mathfrak{v}\mathfrak{r}]$, и мы можем определить момент импульса частицы векторной матрицей

$$\mathfrak{P} = m[\mathfrak{r}\mathfrak{v}] = -m[\mathfrak{v}\mathfrak{r}]. \tag{38}$$

Эта матрица удовлетворяет приведенным ниже перестановочным соотношениям, представляющим собой прямое следствие соотношений (31а) и (31б)

$$\begin{gathered} \mathrm{x}\mathrm{P}_x = \mathrm{P}_x\mathrm{x}, \ldots ; \quad \mathrm{x}\mathrm{P}_y - \mathrm{P}_y\mathrm{x} = \mathrm{P}_x\mathrm{y} - \mathrm{y}\mathrm{P}_x = -\frac{h}{2\pi i}\mathrm{z}, \ldots , \\ (\mathfrak{r}\mathfrak{P}) = (\mathfrak{P}\mathfrak{r}) = 0, \end{gathered} \tag{39}$$

а также

$$\begin{gathered} \mathrm{p}_x\mathrm{P}_x = \mathrm{P}_x\mathrm{p}_x, \ldots ; \\ \mathrm{p}_x\mathrm{P}_y - \mathrm{P}_y\mathrm{p}_x = \mathrm{P}_x\mathrm{p}_y - \mathrm{p}_y\mathrm{P}_x = -\frac{h}{2\pi i}\mathrm{p}_z, \ldots , \\ (\mathfrak{P}\mathfrak{p}) = (\mathfrak{p}\mathfrak{P}) = 0. \end{gathered} \tag{40}$$

Отсюда следует далее, что матрица $\mathrm{v}^2 = \dot{\mathrm{x}}^2 + \dot{\mathrm{y}}^2 + \dot{\mathrm{z}}^2$ коммутирует с матрицами P_x, P_y, P_z [10]:

$$\mathrm{v}^2\mathfrak{P} = \mathfrak{P}\mathrm{v}^2. \tag{41}$$

[10] Следует учесть тождество $\mathrm{a}^2\mathrm{b} - \mathrm{b}^2\mathrm{a} \equiv \mathrm{a}(\mathrm{ab} - \mathrm{ba}) + (\mathrm{ab} - \mathrm{ba})\mathrm{a}$.

Кроме того, из отношений (34) следует коммутативность матрицы r с матрицами P_x, P_y, P_z:

$$r\mathfrak{P} = \mathfrak{P}r. \tag{42}$$

Поэтому и всякая функция F(r), зависящая от одной только матрицы r, коммутирует с матрицей $\mathfrak{P}$. Если мы имеем дело с центральной силой, где потенциальная энергия зависит только от r,

$$\frac{m}{2}\mathfrak{b}^2 + F(r) = E \quad \text{(диагональная матрица)}, \tag{35'}$$

то в соответствии со сказанным имеем

$$E\mathfrak{P} = \mathfrak{P}E,$$

т. е. векторная матрица $\mathfrak{P}$ постоянна во времени (интеграл момента импульса).

Для векторного произведения матрицы $\mathfrak{P}$ на саму себя (см. (37')) легко получается соотношение [11], которое потребуется нам позднее:

$$[\mathfrak{P}\mathfrak{P}] = -\frac{h}{2\pi i}\mathfrak{P}. \tag{43}$$

Например, для z-компоненты векторного произведения $[\mathfrak{P}\mathfrak{P}]$ в соответствии с формулами (39) и (40) имеем

$$P_xP_y - P_yP_x = P_x(zp_x - xp_z) - (zp_x - xp_z)P_x =$$
$$= (P_xz - zP_x)p_x - x(P_xp_z - p_zP_x) = \frac{h}{2\pi i}(yp_x - xp_y) = -\frac{h}{2\pi i}P_z.$$

Теперь мы можем вычислить радиальный импульс

$$p_r = m\dot{r}.$$

Именно, он дается равенством

$$p_r = \frac{2\pi i}{h}m(Er - rE) = \frac{2\pi i}{h}\cdot\frac{1}{2}\left[(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)r - r(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\right] =$$
$$= \frac{2\pi i}{h}\cdot\frac{1}{2}\Big[p_x(p_xr - rp_x) + p_y(p_yr - rp_y) + p_z(p_zr - rp_z) +$$
$$+ (p_xr - rp_x)p_x + (p_yr - rp_y)p_y + (p_zr - rp_z)p_z\Big].$$

Следовательно, учитывая соотношение (34), находим

$$p_r = \frac{1}{2}\left[\left(\mathfrak{p}\frac{\mathfrak{r}}{r}\right) + \left(\frac{\mathfrak{r}}{r}\mathfrak{p}\right)\right]. \tag{44}$$

Теперь, в соответствии с соотношением (33), имеем

$$\left(\mathfrak{p}\frac{\mathfrak{r}}{r}\right) - \left(\frac{\mathfrak{r}}{r}\mathfrak{p}\right) = \frac{h}{2\pi i}\nabla\frac{\mathfrak{r}}{r} = \frac{h}{2\pi i}\frac{2}{r},$$

[11] См. «Квантовая механика II», уравнение (3) (с. 127–175). Величины, обозначаемые там через M_x, M_y, M_z, соответствуют *отрицательным* моментам импульса.

так, что формулу (44) можно также написать в виде

$$\mathfrak{p}_r = (\mathfrak{p}\mathfrak{r})\frac{1}{r} - \frac{h}{2\pi i}\frac{1}{\mathrm{r}} = \frac{1}{r}(\mathfrak{r}\mathfrak{p}) + \frac{h}{2\pi i}\frac{1}{\mathrm{r}}. \tag{44'}$$

Умножая на r, мы получаем отсюда, во-первых, соотношение, которое также следует прямо из равенства (30) при дифференцировании по времени

$$\mathfrak{p}_r\mathrm{r} + \mathrm{r}\mathfrak{p}_r = (\mathfrak{p}\mathfrak{r}) + (\mathfrak{r}\mathfrak{p}), \tag{45}$$

и, во-вторых, равенство

$$\mathfrak{p}_r\mathrm{r} - \mathrm{r}\mathfrak{p}_r = (\mathfrak{p}\mathfrak{r}) - (\mathfrak{r}\mathfrak{p}) - \frac{h}{2\pi i}\cdot 2.$$

Значение разности $(\mathfrak{p}\mathfrak{r}) - (\mathfrak{r}\mathfrak{p})$ теперь равно

$$(\mathrm{p}_x\mathrm{x} - \mathrm{x}\mathrm{p}_x) + (\mathrm{p}_y\mathrm{y} - \mathrm{y}\mathrm{p}_y) + (\mathrm{p}_z\mathrm{z} - \mathrm{z}\mathrm{p}_z),$$

а каждое из выражений в скобках по формуле (31б) имеет значение

$$\frac{h}{2\pi i}\cdot 1.$$

Следовательно, в целом мы получаем

$$\mathfrak{p}_r\mathrm{r} - \mathrm{r}\mathfrak{p}_r = \frac{h}{2\pi i}\cdot 1. \tag{46}$$

Наконец, для применения в дальнейшем мы вычислим еще производную $\frac{\mathfrak{r}}{r}$ по времени. Учитывая соотношение (34), имеем, например, для x-компоненты

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}} &= \frac{2\pi i}{h}\left(E\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}} - \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}}E\right) = \frac{2\pi i}{h}\frac{1}{2m}\left(\mathfrak{p}^2\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}} - \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}}\mathfrak{p}^2\right) = \\
&= \frac{2\pi i}{h}\frac{1}{2m}\left\{\mathfrak{p}\left(\mathfrak{p}\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}} - \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}}\mathfrak{p}\right) + \left(\mathfrak{p}\frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}} - \frac{\mathrm{x}}{\mathrm{r}}\mathfrak{p}\right)\mathfrak{p}\right\} = \\
&= \frac{1}{2m}\left\{\left(\mathrm{p}_x\frac{\mathrm{y}^2+\mathrm{z}^2}{\mathrm{r}^3} - \mathrm{p}_y\frac{\mathrm{xy}}{\mathrm{r}^3} - \mathrm{p}_z\frac{\mathrm{xz}}{\mathrm{r}^3}\right) + \left(\frac{\mathrm{y}^2+\mathrm{z}^2}{\mathrm{r}^3}\mathrm{p}_x - \frac{\mathrm{xy}}{\mathrm{r}^3}\mathrm{p}_y - \frac{\mathrm{xz}}{\mathrm{r}^3}\mathrm{p}_z\right)\right\} = \\
&= \frac{1}{2m}\left\{\left(\mathrm{P}_y\frac{\mathrm{z}}{\mathrm{r}^3} - \mathrm{P}_z\frac{\mathrm{y}}{\mathrm{r}^3}\right) + \left(\frac{\mathrm{z}}{\mathrm{r}^3}\mathrm{P}_y - \frac{\mathrm{y}}{\mathrm{r}^3}\mathrm{P}_z\right)\right\}.
\end{aligned}$$

Следовательно, окончательно получаем

$$\frac{d}{dt}\frac{\mathfrak{r}}{\mathrm{r}} = \frac{1}{2m}\left\{\left[\mathfrak{P}\frac{\mathfrak{r}}{\mathrm{r}^3}\right] - \left[\frac{\mathfrak{r}}{\mathrm{r}^3}\mathfrak{P}\right]\right\}. \tag{47}$$

§ 4

Введение постоянной во времени векторной матрицы $\mathfrak{A}$ для кулоновских сил. Исключение координат

Мы переходим теперь к рассмотрению атома, в котором один электрон с массой m_0 и зарядом $-e$ притягивается по закону Кулона неподвижным ядром с зарядом $+Ze$. Для функции Гамильтона мы должны здесь написать

$$\frac{1}{2m_0}\mathfrak{p}^2 - \frac{Ze^2}{\mathrm{r}} = \mathrm{E} \quad \text{(диагональная матрица)}, \tag{48}$$

т. е. в формуле (35′) мы полагаем частный вид F(r):

$$\mathrm{F}(\mathfrak{r}) = -\frac{Ze^2}{\mathfrak{r}}.$$

Уравнения движения, получаемые из закона сохранения энергии по квантовым правилам (36), по форме оказываются здесь аналогичными уравнениям классической механики

$$\dot{\mathfrak{p}} = m_0\ddot{\mathfrak{r}} = -\frac{Ze^2}{\mathrm{r}^3}\mathfrak{r}. \tag{49}$$

Аналогично классической механике (см. уравнение (27)) мы заключаем отсюда в соответствии с формулой (47), что векторная матрица определяемая равенством

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{Ze^2m_0}\,\frac{1}{2}\{[\mathfrak{P}\mathfrak{p}] - [\mathfrak{p}\mathfrak{P}]\} + \frac{\mathfrak{r}}{\mathrm{r}} \tag{50}$$

в частном случае поля кулоновских сил постоянна во времени. В соответствии с соотношениями (40) можно также написать

$$\mathfrak{A} = \frac{1}{Ze^2m_0}\left\{[\mathfrak{P}\mathfrak{p}] + \frac{h}{2\pi i}\mathfrak{p}\right\} + \frac{\mathfrak{r}}{\mathrm{r}} = -\frac{1}{Ze^2m_0}\left\{[\mathfrak{p}\mathfrak{P}] + \frac{h}{2\pi i}\mathfrak{p}\right\} + \frac{\mathfrak{r}}{\mathrm{r}}. \tag{51'}$$

Дальнейшие вычисления проводятся совершенно элементарно с помощью правил, сформулированных в предшествующих параграфах. Прежде всего, получаем аналогичное уравнению конических сечений (28) в классической механике соотношение

$$\frac{1}{2}[(\mathfrak{A}\mathfrak{r}) + (\mathfrak{r}\mathfrak{A})] = -\frac{1}{Ze^2m_0}\left[\mathfrak{P}^2 + \frac{3}{2}\,\frac{h^2}{4\pi^2}\right] + \mathrm{r} \tag{51}$$

и далее перестановочное соотношение

$$\frac{1}{2}([\mathfrak{A}\mathfrak{r}] + [\mathfrak{r}\mathfrak{A}]) = -\frac{h}{2\pi i}\,\frac{3}{2}\,\frac{1}{Ze^2m_0}\mathfrak{P}. \tag{52}$$

Далее, оказываются справедливыми следующие соотношения, из которых координаты x, y, z, r полностью исключены, так что остались только постоянные во времени матрицы $\mathfrak{A}$, $\mathfrak{P}$ и E

$$[\mathfrak{P}\mathfrak{P}] = -\frac{h}{2\pi i}\mathfrak{P}. \tag{I}$$

$$\left\{\begin{aligned} \mathrm{A}_x\mathrm{P}_x &= \mathrm{P}_x\mathrm{A}_x, \ldots, \\ \mathrm{A}_x\mathrm{P}_y - \mathrm{P}_y\mathrm{A}_x &= \mathrm{P}_x\mathrm{A}_y - \mathrm{A}_y\mathrm{P}_x = -\frac{h}{2\pi i}\mathrm{A}_z, \ldots, \\ (\mathfrak{A}\mathfrak{P}) &= (\mathfrak{P}\mathfrak{A}) = 0. \end{aligned}\right. \tag{II}$$

$$[\mathfrak{A}\mathfrak{A}] = \frac{h}{2\pi i}\frac{2}{m_0Z^2e^4}\mathrm{E}\mathfrak{P}. \tag{III}$$

$$1 - \mathfrak{A}^2 = -\frac{2}{m_0Z^2e^4}\mathrm{E}\left(\mathfrak{P}^2 + \frac{h^2}{4\pi^2}\right). \tag{IV}$$

Уравнение (I) идентично уравнению (43) предыдущего параграфа, уравнение (II) построено так же, как (39), уравнение (IV) аналогично уравнению (29) классической механики, однако появление добавочного члена $\frac{h^2}{4\pi^2}$ (как и дополнительного члена $\frac{3}{2}\frac{h^2}{4\pi^2}$ в соотношении (51)) характерно для новой механики.

Существование постоянной во времени векторной матрицы $\mathfrak{A}$ приводит нас к выводу, что атом с одним единственным электроном (аналогично движению Кеплера в классической механике) образует вырожденную систему, если даже не учитывать его пространственную ориентацию. Действительно, из выведенных соотношений легко можно увидеть, что $\mathfrak{A}\mathfrak{P}^2 - \mathfrak{P}^2\mathfrak{A}$ общем случае не обращается в нуль; поскольку, с другой стороны, разность $\mathfrak{A}$E – E$\mathfrak{A}$ равна нулю, определенному значению энергии E может, очевидно, принадлежать не только одно единственное значение $\mathfrak{P}^2$, так что система оказывается действительно вырожденной.

Для такой вырожденной системы амплитуды различных парциальных колебаний, соответствующие переходам между состояниями с заданными значениями энергии, определяются в новой квантовой механике из ее уравнений неоднозначно, как подробно разъяснено Борном, Иорданом и Гейзенбергом[12]; в общем случае постоянные во времени матрицы необязательно будут диагональными, и их элементы могут быть отличны от нуля на таких местах (n, m), которым отвечает исчезающая частота $\nu_m^n = \frac{1}{h}(E_n - E_m) = 0$. В нашем случае каждому значению энергии (каждому значению главного квантового числа) принадлежит матрица, которая содержит постоянные во времени части одной из величин (например, x или r) и имеет ранг (число строк или столбцов), равный статистическому весу рассматриваемого состояния. Эту матрицу, получаемую из первоначальной матрицы приравниванием нулю всех элементов на местах, соответствующих переходным процессам с изменением значения энергии, мы будем называть средним по времени значением рассматриваемой величины и будем обозначать ее чертой сверху (например, $\bar{\text{x}}$ или $\bar{\text{r}}$).

Хотя в вырожденной системе парциальные колебания кинематической величины, принадлежащие одной частоте ν_m^n, и не могут быть определены однозначно по отдельности, значения энергии и статистические веса этих состояний найти все же можно[13]. Поэтому, в принципе, должно быть возможным, не делая дальнейших предположений о виде решения, вывести из уравнений (I)–(IV) бальмеровские термы и соответствующие им статистические веса. К сожалению, нам это пока не удалось, и дальше мы будем решать эти уравнения обходным путем, вводя (различными способами) дополнительные условия, которые делают решение уравнений (I)–(IV) однозначным.

Именно, если вырождение снимается добавочным возмущающим полем с гамильтоновой функцией H_1, то, как показывают вычисления Борна, Иордана и Гейзенберга[14] по теории возмущений, среднее по времени значение функции возмущения $\overline{\text{H}}_1$, взятое по невозмущенному движению, должно изображаться диагональной матрицей. В нашем случае это среднее значение, вообще говоря, будет зависеть не только от энергии невозмущенного движении E, но и еще от $\mathfrak{P}$ и $\mathfrak{A}$.

Если, в частности, возмущающее поле создается добавочными некулоновскими центральными силами, то его среднее значение будет зависеть, не считая E, только от $\mathfrak{P}^2$, так как в этом случае в пространстве нет выделенного направления. Далее, энергия возмущения от магнитного поля, направленного по оси z, зависит только от компоненты импульса P_z, параллельной полю. Поэтому, требуя, чтобы $\mathfrak{P}^2$ и P_z

[12] Квантовая механика II, гл. 2, § 2 (с.127–175).

[13] Квантовая механика II, гл. 2, § 2 и гл. 3 (с.127–175).

[14] Там же.

были *диагональными матрицами*, мы получаем частное решение уравнений (I)–(IV), приспособленное к релятивистской тонкой структуре и к добавочному слабому магнитному полю.

Второй случай, который представляет особенный интерес, относится к эффекту Штарка. Здесь дело в том, что постоянная во времени векторная матрица $\bar{\mathfrak{r}}$, представляющая электрический центр орбиты, обладает в направлении поля (направлении оси z) компонентой $\bar{\mathfrak{z}}$, являющейся диагональной матрицей. Но теперь можно показать, что матрица $\bar{\mathfrak{r}}$ связана с матрицей $\mathfrak{U}$ совершенно так же, как в классической теории, а именно соотношением

$$\bar{\mathfrak{r}} = \frac{3}{2}\,\frac{Ze^2}{2|E|}\mathfrak{U}. \tag{53}$$

(В классической теории величина $\frac{Ze^2}{2|E|}$ равна большой полуоси a кеплерова эллипса.) Действительно, для $\bar{\mathfrak{r}}$ и $\mathfrak{P}$ в соответствии с уравнениями (39) и (II), прежде всего, выполняются такие же перестановочные соотношения, как для $\mathfrak{U}$ и $\mathfrak{P}$. Сравнивая затем уравнения (52) и (III), мы получаем сверх того для разности $\bar{\mathfrak{r}} - \frac{3}{2}\frac{Ze^2}{2|E|}\mathfrak{U}$ еще соотношения $[\mathfrak{U}, \bar{\mathfrak{r}} - \frac{3}{2}\frac{Ze^2}{2|E|}\mathfrak{U}] = 0$. Как показывает более детальное рассмотрение получаемых в следующем параграфе решений уравнений (I)–(IV), эти соотношения образуют как раз столько однородных линейных уравнений, чтобы можно было сделать вывод о том, что разность $\bar{\mathfrak{r}} - \frac{3}{2}\frac{Ze^2}{2|E|}\mathfrak{U}$ обращается в нуль. Если к электрическому полю в направлении оси z мы добавили еще магнитное поле в том же направлении, то в соответствии с соотношением (53) мы можем характеризовать этот случай требованием, чтобы A_z и P_z были *диагональными матрицами*.

Наконец, в следующем параграфе мы рассмотрим в заключение еще случай скрещенных электрических и магнитных полей, представляющий особенный интерес, как было подробно разъяснено в § 2, в связи с дополнительными запретами сингулярных движений в существовавшей до сих пор теории.

§ 5
Решение уравнений (I)–(IV). Вывод бальмеровских термов

A

Имеем диагональные матрицы P_z и $\mathfrak{P}^2$.

Для того, чтобы в этом первом рассматриваемом нами случае, который соответствует снятию вырождения добавочным центральным полем и слабым магнитным полем в направлении оси z, удовлетворить сначала уравнениям (I) и (II), мы поступим следующим образом. Пусть при заданном значении $\mathfrak{P}^2$ возможные значения P_z будут

$$P_{z\,k,m}^{\,k,m} = m\frac{h}{2\pi}, \tag{54}$$

где m изменяется от $-k$ до $+k$:

$$-k \leqslant m \leqslant k. \tag{54'}$$

Далее, пусть парциальные колебания импульса $\mathfrak{P}$, соответствующие изменению m на единицу, будут поляризованы по кругу влево и вправо в плоскости (x, y):

$$P_{y\,k,m\pm1}^{\,k,m} = \pm i P_{x\,k,m\pm1}^{\,k,m}. \tag{55}$$

Из уравнения (I) тогда следует

$$\left|P_{x\,k,m\pm1}^{k,m}\right|^2=\left|P_{y\,k,m\pm1}^{k,m}\right|^2=\frac{1}{4}\frac{h^2}{4\pi^2}[k(k+1)-m(m\pm1)]=\frac{1}{4}\frac{h^2}{4\pi^2}(k\pm m)(k+1\mp m). \quad (56)$$

$$(\mathfrak{P}^2)_{k,m}^{k,m}=\frac{h^2}{4\pi^2}k(k+1). \quad (57)$$

Теперь в соответствии с формулами Хенля—Кронига для интенсивности зеемановских компонент мы будем полагать, что для матрицы $\mathfrak{A}$

$$A_{y\,k',m\pm1}^{k,m}=iA_{x\,k',m\pm1}^{k,m} \quad (k'=k+1 \quad \text{или} \quad k-1), \quad (58)$$

$$\left|A_{x\,k,m\pm1}^{k+1,m}\right|^2=\left|A_{y\,k,m\pm1}^{k+1,m}\right|^2=\frac{1}{4}C_k^{k+1}(k\mp m)(k\mp m+1). \quad (59)$$

Заменяя здесь m на $m-1$ или $m+1$, мы получаем еще

$$\left|A_{x\,k+1,m\pm1}^{k,m}\right|^2=\left|A_{y\,k+1,m\pm1}^{k,m}\right|^2=\frac{1}{4}C_{k+1}^{k}(k\pm m+1)(k\pm m+2). \quad (59a)$$

Наконец, для A_z имеем

$$\left|A_{z\,k,m}^{k+1,m}\right|^2=C_k^{k+1}\left[(k+1)^2-m^2\right]. \quad (60)$$

Остается еще открытым вопрос о том, будет ли число m (а значит, и k) полуцелым или целым; далее величины C_k^{k+1} означают пока еще не определенные неотрицательные функции k, которые удовлетворяют соотношению симметрии

$$C_k^{k+1}=C_{k+1}^{k}. \quad (61)$$

По поводу знаков $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{P}$ следует еще заметить, что, если P_x и A_z считать положительными вещественными величинами, A_x будет положительной или отрицательной вещественной величиной, в зависимости от того, имеем мы дело с переходами, в которых k и m изменяется в противоположном (как при $A_{x\,k+1,m-1}^{k,m}$ и $A_{x\,k-1,m+1}^{k,m}$) или в одинаковом (как при $A_{x\,k+1,m+1}^{k,m}$ и $A_{x\,k-1,m-1}^{k,m}$) смысле. При сделанных допущениях, как показывают вычисления, уравнения (I) и (II) предыдущего параграфа выполняются. Кроме того, из выводов Борна, Иордана и Гейзенберга[15)] вытекает, что и при обратном предположении о диагональной форме матриц $\mathfrak{P}^2$ и P_z выражения, принятые здесь для $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{P}$, образуют необходимое следствие из уравнений (I) и (II).

Для определения нормировки m и k, а также вида функции C_{k+1}^{k} мы возьмем уравнение (III) предыдущего параграфа. При этом достаточно рассмотреть только z-компоненту

$$A_xA_y-A_yA_x=\frac{h}{2\pi i}\frac{2}{m_0Z^2e^4}EP_z. \quad (62)$$

Образуя теперь выражение

$$P_y(A_xA_y-A_yA_x)-(A_xA_y-A_yA_x)P_y=\frac{h}{2\pi i}\frac{2}{m_0Z^2e^4}E(P_yP_z-P_zP_y)$$

[15)] Квантовая механика II, гл. 4, § 1 (с.127–175). См. также выводы об эффекте Зеемана в гл. 4, § 2.

и используя уравнения (I) и (III), мы получаем уравнение, совпадающее с x-компонентой равенства (III). Совершенно так же и y-компонента (III) есть следствие z-компоненты этого векторного уравнения и уравнений (I) и (II).

Если мы образуем элемент уравнения (62), стоящий на месте (k, m) по диагонали, то в соответствии с формулами (58) и (59) мы получаем сначала для левой части

$$(\mathrm{A}_x\mathrm{A}_y - \mathrm{A}_y\mathrm{A}_x)^{k,m}_{k,m} = 2i\left\{\left|A_{x\,k+1,m-1}^{\,k,m}\right|^2 - \left|A_{x\,k+1,m+1}^{\,k,m}\right|^2 + \left|A_{x\,k-1,m-1}^{\,k,m}\right|^2 - \left|A_{x\,k-1,m+1}^{\,k,m}\right|^2\right\} = \\ = im\left\{-(2k+3)C_k^{k+1} + (2k-1)C_{k-1}^k\right\}.$$

Учитывая еще, что E имеет отрицательный знак, и вводя постоянную Ридберга

$$R = \frac{2\pi^2 e^4 m_0}{h^3} \tag{63}$$

и значение (54) для P_z, мы получаем в соответствии с соотношением (62) условие

$$m\left\{-(2k+3)C_k^{k+1} + (2k-1)C_{k-1}^k\right\} = \frac{|E|}{RhZ^2}m. \tag{64}$$

Рассмотрим сначала наименьшее значение k возможное при заданной величине $|E|$. Для него, очевидно, вклад перехода $k \to k-1$ в левой стороне отпадает, коэффициент при m в левой стороне становится поэтому безусловно неположительным, тогда как коэффициент при m в правой стороне положителен. Поэтому уравнение (64) может быть выполнено для минимального значения k только в том случае, если $m = 0$. Но это по формулам (54) означает, что указанное минимальное значение k само должно быть нулем, ибо иначе число m могло бы принимать еще и другие значения. *Поэтому числа k и m необходимо должны быть целыми*, и для k мы можем принять значения

$$k = 0, 1, 2, \ldots, n^*, \tag{65}$$

если целое число n^* означает максимальное значение k, достижимое при заданной величине $|E|$.

Теперь из условия (64) следует

$$(2k-1)C_{k-1}^k - (2k+3)C_k^{k+1} = \frac{|E|}{RhZ^2}, \quad k = 1, \ldots, n^*. \tag{64'}$$

При этом необходимо, кроме того, положить

$$C_{n^*}^{n^*+1} = 0, \tag{64''}$$

так как для $k = n^*$ вклад перехода $k+1 \to k$ (второй член), очевидно, отпадает. Теперь можно, начиная с $k = n^*$ и уменьшая k на единицу, последовательно находить по формуле (64') значения коэффициентов

$$C_{n^*-1}^{n^*},\ C_{n^*-2}^{n^*-1},\ \ldots,\ C_0^1.$$

Результат можно представить формулой

$$C_k^{k+1} = \frac{|E|}{Rhz^2}\frac{n^*(n^*+2) - k(k+2)}{(2k+1)(2k+3)} = \frac{|E|}{RhZ^2}\frac{(n^*-k)(n^*+k+2)}{(2k+1)(2k+3)}, \tag{66}$$

из которой при замене k на $k-1$ еще получается

$$C_{k-1}^{k} = \frac{|E|}{Rhz^2}\frac{n^*(n^*+2)-(k-1)(k+1)}{(2k-1)(2k+1)} = \frac{|E|}{RhZ^2}\frac{(n^*-k+1)(n^*+k+1)}{(2k-1)(2k+1)}. \qquad (66')$$

С помощью этих формул мы непосредственно подтверждаем, что соотношения (64′) и (64″) выполняются.

Наконец, чтобы определить сами значения энергии, мы используем еще последнее уравнение (IV). Сначала мы вычислим значение элемента $\mathfrak{U}^2$ на месте k, m по диагонали. Учитывая формулы (59) и (60), получаем

$$\begin{aligned}(\mathfrak{U}^2)_{k,m}^{k,m} &= 2\left|A_{x\,k+1,m+1}^{\;k,m}\right|^2 + 2\left|A_{x\,k+1,m-1}^{\;k,m}\right|^2 + \left|A_{z\,k+1,m}^{\;k,m}\right|^2 + \\ &+ 2\left|A_{x\,k-1,m+1}^{\;k,m}\right|^2 + 2\left|A_{x\,k-1,m-1}^{\;k,m}\right|^2 + \left|A_{z\,k-1,m}^{\;k,m}\right|^2 = \\ &= (k+1)(2k+3)C_k^{k+1} + k(2k-1)C_{k-1}^{k}\end{aligned}$$

и после подстановки значений (66) и (66′)

$$(\mathfrak{U}^2)_{k,m}^{k,m} = \frac{|E|}{RhZ^2}\left[n^{*2} + 2n^* - k(k+1)\right]. \qquad (67)$$

Это выражение для $\mathfrak{U}^2$ вместе с выражением (57) для $\mathfrak{P}^2$ мы подставим теперь в уравнение (IV). Получаем

$$1 = \frac{|E|}{RhZ^2}\left(n^{*2} + 2n^* + 1\right) = \frac{|E|}{RhZ^2}\left(n^* + 1\right)^2,$$

следовательно, как и было указано в § 2 (при подстановке $n = n^* + 1$):

$$|E| = \frac{RhZ^2}{(n^*+1)^2} = \frac{RhZ^2}{n^2}. \qquad (68)$$

Тем самым показано, что из новой квантовой механики получаются правильные термы Бальмера, и что согласно новой теории n-квантовое состояние обладает статистическим весом n^2.

Б

Матрицы A_z и P_z диагональные (эффект Штарка). Если в направлении оси z действует однородное электрическое поле напряженностью F, то среднее по времени значение энергии возмущения по формуле (53) будет иметь вид

$$E_1 = \frac{3}{2}eF\bar{z} = \frac{3}{2}eF\frac{Ze^2}{2|E|}A_z. \qquad (69)$$

Таким образом, в этом случае требуется найти такое решение уравнений (I)–(IV), в котором матрица A_z будет диагональной. Если мы потребуем еще, чтобы и матрица P_z была диагональной, то физически это будет означать, что мы снимаем вырождение векового возмущения в эффекте Штарка добавочным слабым магнитным полем, параллельным электрическому полю.

Мы ограничимся здесь тем, что приведем результат без подробных вычислений и без доказательства того, что приведенное решение уравнений (I)–(IV) есть единственное, удовлетворяющее требованию, чтобы матрицы A_z и P_z были

диагональными. Состояния, принадлежащие некоторому определенному значению невозмущенной энергии (68), классифицируются двумя квантовыми числами s и m, из которых одно определяет значение A_z (и добавочной энергии E_1)

$$A_{z\,s,m}^{\,s,m} = \frac{s}{n}, \quad E_1 = \frac{3}{2} eFa_1 ns \quad (0 \leqslant s \leqslant n^*), \quad a_1 = \frac{h^2}{4\pi^2 Ze^2 m_0}, \tag{70}$$

другое дает значение P_z

$$P_{z\,s,m}^{\,s,m} = m\frac{h}{2\pi}. \tag{71}$$

Множество значений s и m было уже определено в § 2 соотношением (13). Матрицы P_x, P_y, A_x, A_y имеют отличные от нуля элементы только на тех местах, которые соответствуют изменениям s и m на ± 1. Значения этих элементов определяются по формулам

$$\left.\begin{aligned} P_{y\,s',m\pm1}^{\,s,m} &= \pm i P_{x\,s',m\pm1}^{\,s,m}, \\ A_{y\,s',m\pm1}^{\,s,m} &= \pm i A_{x\,s',m\pm1}^{\,s,m} \end{aligned}\right\} \quad (s' = s+1 \quad \text{или} \quad s-1), \tag{72}$$

$$\begin{aligned} A_{x\,s\pm1,m\pm1}^{\,s,m} &= +\frac{2\pi}{h}\frac{1}{n} P_{x\,s\pm1,m\pm1}^{\,s,m}, \\ A_{x\,s\mp1,m\pm1}^{\,s,m} &= -\frac{2\pi}{h}\frac{1}{n} P_{x\,s\mp1,m\pm1}^{\,s,m} \end{aligned} \tag{73}$$

(в последних двух соотношениях следует брать либо всегда верхний, либо всегда нижний знак),

$$\begin{aligned} \left|P_{x\,s-1,m-1}^{\,s,m}\right|^2 = \left|P_{y\,s-1,m-1}^{\,s,m}\right|^2 &= \frac{1}{16}\frac{h^2}{4\pi^2}\left[n^* + 2 - (m+s)\right]\left[n^* + (m+s)\right], \\ \left|P_{x\,s+1,m+1}^{\,s,m}\right|^2 = \left|P_{y\,s+1,m-1}^{\,s,m}\right|^2 &= \frac{1}{16}\frac{h^2}{4\pi^2}\left[n^* + 2 - (m-s)\right]\left[n^* + (m-s)\right]. \end{aligned} \tag{74}$$

Проделав вычисления, нетрудно убедиться в том, что формулы (70)–(74) действительно удовлетворяют уравнениям (I)–(IV).

B
Скрещенные поля

Если векторы $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}$ означают напряженности внешних электрического и магнитного полей, то среднее по времени значение энергии возмущении в присутствии одновременно двух полей дается формулой

$$E_1 = \frac{3}{2} ea(\mathfrak{E}\mathfrak{A}) + \frac{e}{2m_0 c}(\mathfrak{H}\mathfrak{P}), \tag{75}$$

где величина a, которая в прежней теории была равна полуоси кеплерова эллипса, здесь понимается просто как сокращенное обозначение для величины

$$a = \frac{Ze^2}{2|E|}. \tag{76}$$

Если мы введем векторы o_F и o_H, параллельные $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{H}$ и по абсолютной величине равные вековым частотам, которые были бы обусловлены только одним из двух

внешних однородных полей, так что для этих векторов имеем (см. формулы (9) и (10))

$$\mathfrak{o}_H = \frac{e\mathfrak{H}}{4\pi m_0 c}, \quad \mathfrak{o}_F = \frac{3}{4\pi}\sqrt{\frac{a}{Zm_0}}\mathfrak{E} = \frac{3}{4\pi}\frac{e\mathfrak{E}}{\sqrt{2m_0|E|}}, \tag{77}$$

то формулу (75) можно также написать в виде

$$\mathrm{E}_1 = \sqrt{\frac{Z^2Rh}{|E|}}(\mathfrak{A}\mathfrak{o}_F)h + 2\pi(\mathfrak{P}\mathfrak{o}_H). \tag{75a}$$

Теперь целесообразно[16] ввести векторные матрицы $\mathfrak{I}_1$ и $\mathfrak{I}_2$, определяемые формулами

$$\begin{aligned} 2\mathfrak{I}_1 &= \frac{2\pi}{h}\mathfrak{P} + \sqrt{\frac{Z^2Rh}{|E|}}\mathfrak{A}, \\ 2\mathfrak{I}_2 &= \frac{2\pi}{h}\mathfrak{P} - \sqrt{\frac{Z^2Rh}{|E|}}\mathfrak{A}. \end{aligned} \tag{78}$$

Тогда имеем

$$\frac{2\pi}{h}\mathfrak{P} = \mathfrak{I}_1 + \mathfrak{I}_2, \quad \sqrt{\frac{Z^2Rh}{|E|}}\mathfrak{A} = \mathfrak{I}_1 - \mathfrak{I}_2. \tag{78a}$$

Далее, получаем два вектора

$$\mathfrak{o}_1 = \mathfrak{o}_H + \mathfrak{o}_F, \quad \mathfrak{o}_2 = \mathfrak{o}_H - \mathfrak{o}_F, \tag{79}$$

абсолютные величины которых в § 2 были обозначены через ω_1 и ω_2 (см. уравнения (18)). Энергия возмущения (75а) принимает теперь простой вид

$$\mathrm{E}_1 = (\mathfrak{I}_1\mathfrak{o}_1)h + (\mathfrak{I}_2\mathfrak{o}_2)h. \tag{80}$$

В уравнениях (I)–(IV) вместо $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{P}$ мы также введем теперь новые векторные матрицы $\mathfrak{I}_1$ и $\mathfrak{I}_2$ по формулам (75а). После простых вычислений мы получаем следующие соотношения

$$\mathrm{I}_{1x}\mathrm{I}_{2x} = \mathrm{I}_{2x}\mathrm{I}_{1x}\ldots, \mathrm{I}_{1x}\mathrm{I}_{2y} = \mathrm{I}_{2y}\mathrm{I}_{1x}\ldots, \mathrm{I}_{2x}\mathrm{I}_{1y} = \mathrm{I}_{1y}\mathrm{I}_{2x}\ldots, \tag{81}$$

$$[\mathfrak{I}_1, \mathfrak{I}_2] = i\mathfrak{I}_1, \quad [\mathfrak{I}_2, \mathfrak{I}_2] = i\mathfrak{I}_2, \tag{82}$$

$$\mathfrak{I}_1^2 = \mathfrak{I}_2^2 = \frac{1}{4}\left(\frac{RhZ^2}{|E|} - 1\right) = \frac{1}{4}(n^2 - 1) = \frac{n^*}{2}\left(\frac{n^*}{2} + 1\right). \tag{83}$$

Соотношения (81) указывают, что каждая компонента $\mathfrak{I}_1$ коммутирует с любой из компонент $\mathfrak{I}_2$, соотношения (82) по структуре совершенно аналогичны уравнениям (I); в конце соотношений (83) введены значения энергии (68).

В соответствии с формулой (80) случай скрещенных полей характеризуется тем, что $(\mathfrak{I}_1\mathfrak{o}_1)$ и $(\mathfrak{I}_2\mathfrak{o}_2)$, или, что то же самое, *компоненты* $\mathfrak{I}_1$ и $\mathfrak{I}_2$, *параллельные* $\mathfrak{o}_1$ и $\mathfrak{o}_2$ (мы будем обозначать их $\mathfrak{I}_{1\|}$ и $\mathfrak{I}_{2\|}$), являются *диагональными* матрицами. Решение уравнений (82) получается в этом случае совершенно аналогично решению уравнений (I), если в первых уравнениях предполагать, что матрицы P^2 и P_z

[16] По поводу следующего см. цитированные в § 2 работы Клейна и Ленца.

диагональные. Вместо k здесь фигурирует $\frac{n^*}{2}$, вместо m, применяя обозначения § 2, уравнения (15) и (16), введены числа $\frac{n^*}{2} - n_1$ и $\frac{n^*}{2} - n_2$, которые могут изменяться в пределах от $-\frac{n^*}{2}$ до $+\frac{n^*}{2}$. В соответствии с этим имеем

$$(\mathfrak{I}_{1\|})^{n_1}_{n_1} = \frac{n^*}{2} - n_1, \quad (\mathfrak{I}_2)^{n_2}_{n_2} = \frac{n^*}{2} - n_2, \quad 0 \leqslant n_1 \leqslant n^*, \quad 0 \leqslant n_2 \leqslant n^*,$$
$$E_1 = \left(\frac{n^*}{2} - n_1\right)\omega_1 h + \left(\frac{n^*}{2} - n_2\right)\omega_2 h \quad (\omega_1 = |\mathfrak{o}_1|, \quad \omega_2 = |\mathfrak{o}_2|). \tag{84}$$

Проекции $\mathfrak{I}_{1\perp}$ и $\mathfrak{I}_{1\perp}$ на плоскости, перпендикулярные направлению $\mathfrak{o}_1$ или $\mathfrak{o}_2$, совершают круговые колебания и потому описываются матрицами, аналогичными матрицам P_x и P_y, определяемым условием (56) (следует заменить k на $\frac{n^*}{2}$ и m на $\frac{n^*}{2} - n_1$ или $\frac{n^*}{2} - n_2$; $\mathfrak{I}^2_\perp$ соответствует сумме $P_x^2 + P_y^2$):

$$\left|\mathfrak{I}_{1\perp}{}^{n_1}_{n_1+1}\right|^2 = \frac{1}{2}(n_1 + 1)(n^* - n_1),$$
$$\left|\mathfrak{I}_{2\perp}{}^{n_2}_{n_2+1}\right|^2 = \frac{1}{2}(n_2 + 1)(n^* - n_2). \tag{85}$$

Тем самым уравнения (81) и (82) выполняются, и поскольку по аналогии с формулой (57) мы имеем

$$(\mathfrak{I}_1^2)^{n_1}_{n_1} = (\mathfrak{I}_2^2)^{n_2}_{n_2} = \frac{n^*}{2}\left(\frac{n^*}{2} + 1\right),$$

уравнение (83) при значениях энергии (68) также удовлетворяется.

Таким образом, мы вывели из новой механики все результаты, указанные в § 2.

§ 6
К вопросу об отношении спектра водорода к спектрам щелочных металлов

Еще в § 2 было упомянуто, что видоизменения основ новой квантовой механики, необходимые для объяснения аномального эффекта Зеемана, проявились бы, возможно, уже в атомах с одним единственным электроном; в частности, результат, согласно которому нормальное состояние такого атома должно быть немагнитным, следует, вероятно, считать неокончательным. Специальное предположение о том, как учитывать аномальный эффект Зеемана, недавно было высказано Гоудсмитом и Уленбеком[17]. Согласно этому предположению, электрон уже не следует рассматривать как точечный заряд, а надо наделить его выделенной осью, вращательным моментом и (аномально удвоенным) магнетизмом. Вопрос о том, достаточно ли это предположение для того, чтобы в сочетании с новой квантовой механикой объяснить все результаты опыта, может быть решен только в том случае, если на основе новой механики будут выполнены также и расчеты релятивистской тонкой структуры. Однако это пока остается за пределами нашего рассмотрения, так как нам еще не удалось вычислить необходимое для этого среднее по времени значение $\overline{\frac{1}{r^2}}$.

Однако независимо от специальных модельных представлений напрашивается вопрос, нельзя ли понимать спектр водорода (включая тонкую структуру и влияние внешних полей) как предельный случай спектров щелочных металлов или

[17] *Goudsmit S., Uhlenbeck G. E.* Naturwiss., 1925, **13**, 953.

рентгеновских спектров при исчезающей силе воздействия атомного остатка на валентный электрон, либо при исчезающих числах экранирования (так что уровни, образующие экранированный дублет, совпадают) [18]. В этом случае тонкая структура линий Бальмера отличалась бы от структуры, соответствующей прежней теории, если не положением уровня энергии и компонент линии, то их интенсивностями, причем тогда вместо правила отбора $\Delta k = \pm 1$ следовало бы применять правило отбора $\Delta j = 0, \pm 1$, разрешающее появление линий, которые исключались прежней теорией. Гоудсмит и Уленбек [19] сумели показать, что наблюдаемые результаты говорят о вероятности такого изменения правил отбора. Но вместе с тем они указали на то, что попытка провести аналогию между спектром водорода и спектрами щелочных металлов встречается с тем затруднением, что эффект Зеемана в слабых (по отношению к тонкой структуре) магнитных полях для спектров атомов с одним единственным электроном по данным опыта, по-видимому, не имеет никакого сходства с аналогичным эффектом в спектрах щелочных металлов.

Хотя вопрос о том, насколько далеко можно провести рассматриваемую аналогию между спектрами водорода и щелочных металлов, остается тем самым еще невыясненным, аналогия эта представляется все же оправданной, по крайней мере, во всех случаях, когда можно отвлечься от релятивистской (или дублетной) тонкой структуры. Это приводит к предположению, что в магнитных полях, в которых зеемановское расщепление велико по сравнению с промежутками между компонентами тонкой структуры, магнитные уровни энергии в спектрах атомов с одним единственным электроном по их числу и положению должны совпадать с термами Пашена—Бака в спектрах щелочных металлов. Тогда атом водорода во внешнем силовом поле должен иметь вдвое больше состояний, чем было получено в предшествующих параграфах из сегодняшних основ новой квантовой механики (т. е. $2n^2$ состояний вместо n^2). Во внешнем магнитном поле каждому значению квантового числа m (которое изменяется от $-n^*$ до $+n^*$) тогда должны соответствовать два значения магнитной энергии $((m \pm 1)o_H h$ (o_H — ларморова частота), в скрещенных полях каждое из характеризуемых числами n^*, n_1, n_2 состояние также должно расщепляться на два состояния, значения энергии которых отличаются от значений по формуле (84) на $\pm o_H h$. По принципу соответствия тогда будут происходить только такие переходы, которые не изменяют знак добавочного члена $\pm o_H h$.

Сделать выбор между полученным в предшествующих параграфах множеством термов, в котором нормальное состояние атома H немагнитное, и рассмотренным здесь по аналогии с термами Пашена—Бака для щелочных металлов множеством термов, в котором нормальному состоянию атома H в магнитном поле отвечают значения добавочной энергии $\pm o_H h$, можно было бы в опытах по отклонению атомных пучков H неоднородным магнитным полем по Штерну и Герлаху.

(*Поступила 17 января 1926 г.*)

---

[18] *Goudsmit S., Uhlenbeck G. E.* Physica, 1925, 5, 266. Сходные соображения уже давно были сообщены письменно А. Ланде.

[19] *Goudsmit S., Uhlenbeck G. E.* Physica, 1925, 5, 266.

ФЛУКТУАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ И КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА*

В настоящей заметке делается попытка показать, что квантовая механика с требуемыми теорией дисконтинуума флуктуационными формулами всегда непротиворечива.

Большое физическое значение флуктуационных явлений связано с тем, что они принадлежат к наиболее наглядным и непосредственным проявлениям разрывности (Diskontinuitäten) на малых расстояниях и временах. Например, по Энштейну броуновское движение можно рассматривать как прямое следствие атомистической структуры вещества; флуктуации энергии и импульса в полости с излучением непосредственно приводят к энштейновским представлениям о квантах света; флуктуации энергии, например в кристаллической решетке, тесно связаны с существованием дискретных стационарных состояний механической системы. Так как теория механических систем стала доступна количественному рассмотрению с помощью квантовой механики, между квантовой механикой и последней из названных выше разновидностей флуктуационных явлений должна существовать какая-то весьма тесная взаимосвязь. Именно эта связь и будет выяснена ниже. Таким образом, настоящая заметка представляет собой расширение и уточнение соображений, изложенных Борном, Иорданом и автором [1)] ранее в связи с общей схемой квантовой механики [2)]. Я считаю необходимым более глубокое исследование обнаруженных в указанной работе зависимостей, так как в последнее время с различных сторон возникли сомнения в существовании проявлений дискретности.

§1

Математическая часть приводимых ниже соображений примыкает к работе автора о квантовомеханическом резонансе [3)] Начнем со следующей задачи. Два одинаковых атома a и b находятся (всеми силами излучения мы пренебрегаем) первоначально в состояниях n и m, т.е. $W^a = E_n$, $W^b = E_m$, и связаны между собой очень слабым взаимодействием. Между двумя атомами возникает резонанс. Наглядно этот резонанс может быть описан двумя различными способами.

---

* Schwankungserscheinungen und Quantenmechanik. — Zs. Phys., 1926, **40**, 501–506. *Перевод Ю.А.Данилова.*

[1)] *Born M., Heisenberg W., Jordan P.* Quantenmechanik II. Zs. Phys., 1926, **35**, 557–615, Kap. 4, § 3. — Русский перевод: с. 127–175.

[2)] Критика А. Смекаля (*Smekal A.* Zs. Phys., 1926, **37**, 319) не относится к рассматриваемому здесь случаю механических систем; может ли эта критика привести к плодотворным результатам в случае полости с излучением, в настоящее время неизвестно; я склонен полагать, что случай полости с излучением аналогичен кристаллической решетке.

[3)] *Heisenberg W.* Mehrkörperproblem und Resonanz inder Quantenmechanik. Zs. Phys., 1926, **38**, 411–426 (далее цитируется как l. c.). — Русский перевод: с. 176–186.

1. Со временем происходят с определенной частотой скачки энергии, при этом W^a одновременно дискретно изменяется из E_n в E_m, а W^b — из E_m в E_n или наоборот. Иначе говоря, со временем «квант света»[4] $(E_n - E_m)$ переходит от одного атома к другому и через некоторое время возвращается. В среднем из-за симметрии квант света половину времени проводит в атоме a, а другую половину — в атоме b.

2. Резонанс следует рассматривать как соответствующий аналог классического взаимодействия между двумя осцилляторами, поэтому энергия будет с низкой частотой пульсировать между атомами a и b. Энергия одного атома будет гармонически периодической функцией времени.

В такой форме описание 1 полностью противоречит описанию 2. Но квантовая механика существенно модифицирует такое корреспонденц-описание и делает возможным математический анализ происходящего: бессмысленно говорить об определенном состоянии всей системы, об энергии одного атома как функции времени. Только среднее значение любой зависящей от времени величины имеет физический смысл в определенном состоянии всей системы. Энергия атома в рассматриваемом нами случае формально может быть представлена матрицей, соответствующей гармонической функции времени. Но гармонические члены этой матрицы соответствуют двум состояниям всей системы. До тех пор, пока переходы всей системы не принимаются во внимание, принципиально наблюдаемы только средние по времени, о которых упоминалось выше.

Покажем, что для всех принципиально наблюдаемых эффектов описание 2 эквивалентно описанию 1. Первый вопрос, который возникает: можно ли, например, с помощью столкновения с одним из двух атомов, экспериментально установить значения энергии, лежащие где-то между E_n и E_m. Ответ, относящийся к описанию 1, и к описанию 2, гласит: нет. В случае 2 необходимо только применить основные определения квантовой механики ко всей системе (включающей в себя оба атома a и b), чтобы убедиться в том, что (с точностью до величин порядка взаимодействия) переноситься могут только такие же разности энергии $(E_n - E_m)$, какие переносились без взаимодействия при процессах столкновения. Чтобы продвинуться дальше, предположим, что вычислена квантовомеханическая матрица для энергии отдельного атома (например для a). Все матрицы системы с взаимодействием получаются из матриц невозмущенной системы с помощью канонического преобразования с матрицей S (см. соотношения (8) и (7) в l. c.):

$$\begin{aligned} W' &= S^{-1} W S, \\ q' &= S^{-1} q S. \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь S (см. соотношение (12) в l. c.) — матрица с элементами

$$\begin{aligned} S_{nm,nm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad S_{nm,mn} = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ S_{mn,nm} &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad S_{mn,mn} = -\frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{2}$$

Таким образом, если обозначить через W^a энергию атома a в невозмущенной системе, через W'^a — энергию атома в возмущенной системе, то

$$W'^a = S^{-1} W S. \tag{3}$$

[4] Возможно, выражение «квант звука» было бы точнее, так как речь идет о механических колебательных состояниях.

Из соотношений (2) следует, что W'^a — матрица с элементами

$$\begin{aligned} W'^a_{nm,nm} &= \frac{1}{2}(E_n + E_m), & W'^a_{nm,mn} &= \frac{1}{2}(E_n - E_m), \\ W'^a_{mn,nm} &= \frac{1}{2}(E_n - E_m), & W'^a_{mn,mn} &= \frac{1}{2}(E_n + E_m). \end{aligned} \tag{4}$$

Принципиально наблюдаемыми величинами в определенном состоянии, например в состоянии nm всей системы, следует считать: среднее по времени самой матрицы W^a, средний квадрат флуктуаций энергии, любые средние флуктуаций. Все эти флуктуации могут быть совершенно общим образом сведены к среднему значению любой функции от W: $f(W)$ (например к среднему значению матриц W^2, W^4 и т. д.). Вычислим поэтому значение такой функции f:

$$f' = S^{-1} f S, \tag{5}$$

следовательно,

$$f'_{nm,nm} = \frac{1}{2}\big(f(E_n) + f(E_m)\big),$$

а также

$$f'_{mn,mn} = \frac{1}{2}\big(f(E_n) + f(E_m)\big).$$

Нетрудно увидеть, что эти значения полностью эквивалентны значениям, полученным в рамках описания 1. Вопрос можно поставить и наоборот: существует ли такая функция $E(t)$, что среднее значение любой произвольной функции $f(E)$ удовлетворяет соотношению

$$\overline{f(E(t))} = \frac{1}{2}\big(f(E_n) + f(E_m)\big)$$

(соотношению (12) работы l. c.).

Нетрудно видеть, что этим свойством обладают только функции того типа, который представлен на рис. 1, причем суммарная длина верхних отрезков кривой в среднем равна суммарной длине нижних отрезков, что в точности соответствует предположениям, положенным в основу описания 1.

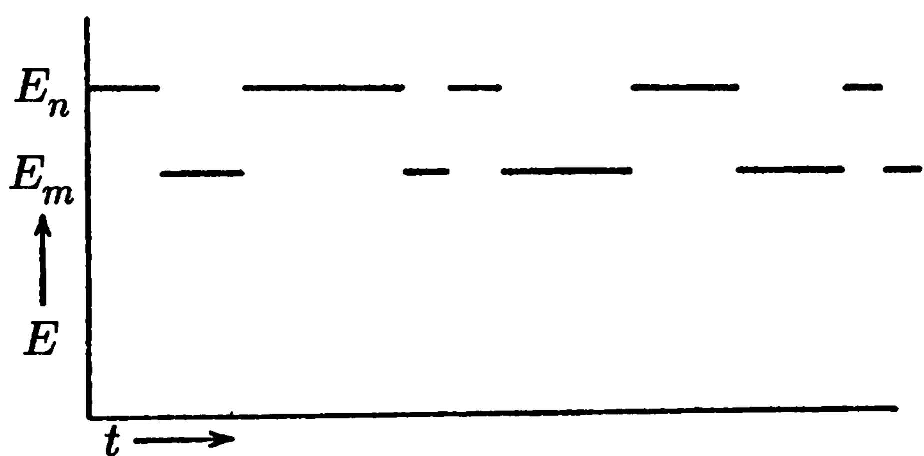


Рис. 1

Итак, подведем итог: в рассмотренном нами случае квантовая механика в том, что касается всех флуктуационных величин, приводит к тем же результатам, что и представление о дискретных скачках, иначе говоря, оказывается, что проявления дискретности органически присущи квантовой механике. Создается впечатление, будто квантовая механика позволяет утверждать о дискретных процессах не больше и не меньше, чем можно подтвердить экспериментально. Моменты времени, когда происходят дискретные процессы, и вообще сами процессы, в эту схему не вписываются. По нашему мнению, физический смысл рис. 1 имеют только суммарная длина верхних и суммарная длина нижних отрезков.

К сказанному следует добавить, что все вычисления проведены нами в приближении, в котором оба атома считаются имеющими исчезающе малые размеры.

Но рассматриваемая задача вообще определена именно в этом приближении. Понятие «энергия атома» имеет определенный смысл лишь до тех пор, пока энергию взаимодействия можно считать пренебрежимо малой.

§ 2

Математической основой совпадения квантовомеханических средних флуктуаций с теорией дисконтинуума служит форма канонического преобразования (1), (5). С другой стороны, эта форма столь широко распространена в квантовой механике, что приведенные выше соображения относительно флуктуаций могут быть перенесены и на самый общий случай. Прежде всего, предположения из § 1 о том, что a и b — два атома, несущественно; в действительности речь может идти о любых одинаковых механических системах. Кроме того, все приведенные выше соображения остаются в силе, если включить взаимодействие нескольких одинаковых механических систем. Невозмущенная система обладает сильным вырождением. Форма (1), (5) канонического преобразования всегда сохраняется, но сама матрица S изменяется. Совпадение флуктуаций дисконтинуума с квантовомеханическими флуктуациями не зависит от элементов матрицы S, существенна лишь форма канонического преобразования.

Обозначим состояния какой-нибудь возмущенной механической системы индексом α, а состояния невозмущенной механической системы индексом β. Тогда каноническое преобразование (1), (5) означает в смысле представления о дисконтинууме следующее: *если возмущенная система находится в состоянии α, то $|S_{\alpha\beta}|^2$ — вероятность того, что (в результате процессов столкновения, внезапного выключения возмущения и т. д.) система переходит в состояние β.* Из (5) следует, что для любой функции, например для W_a, выполняется соотношение

$$f_\alpha(W^a) = \sum_\beta |S_{\alpha\beta}|^2 f(W^\alpha_\beta), \tag{6}$$

где W^α_β — то значение W^a, которое система a принимает в состоянии b. Разумеется, согласно общим принципам,

$$\sum_\beta |S_{\alpha\beta}|^2 = 1. \tag{7}$$

В качестве второго обобщения можно отбросить предположения о том, что речь идет об одинаковых механических системах. В действительности необходима лишь гипотеза о том, что во всех системах встречается одна и та же разность энергий $E_n - E_m$, так как в противном случае (в том числе и для систем, в которых эта разность не фигурирует) нельзя было бы говорить о резонансе. Если воспользоваться терминологией теории дисконтинуума, то можно было бы сказать: квант света $E_n - E_m$ обнаруживается во всех системах. Вычисления из § 1 могут быть перенесены на этот случай без изменения.

Третье обобщение, которое следует предполагать, связано с характером величин, флуктуации которых подлежат изучению. Приведенные выше соображения остаются без изменений, если вместо энергии подсистемы рассматривать любую другую величину, которая в невозмущенном случае может быть представлена диагональной матрицей. К такого рода величинам относятся, например, полный угловой момент, угловой момент относительно неподвижной оси и т. д. Средние значения флуктуаций всех этих величин, вычисленные в § 1 на основе квантовой механики, совпадают со средними значениями флуктуаций, вычисленными в рамках представления о дисконтинууме. *Если мы вообще хотим говорить об энергии, угловом моменте и т. д.*

механической системы как функции времени, то, как показывает квантовая механика, рассматривать следует только функции того типа, который представлен на рис. 1. В качестве коэффициентов вероятности всегда входят одни и те же величины $|S_{\alpha\beta}|^2$.

Наконец, соображения, изложенные в § 1, остаются в силе и в случае апериодических движений, так как сохраняется форма канонического преобразования (1), (5). В заключение следует упомянуть в качестве примера, в какой мере в приведенных выше соображениях сохраняются проведенные Борном, Иорданом и автором[5] вычисления флуктуаций в кристаллической решетке. Речь идет о флуктуациях энергии в малых парциальных объемах кристалла. В невозмущенной системе парциальные объемы следует вырезать из кристаллов. В возмущенной системе резонанс возникает относительно всех собственных колебаний, частоты которых равны частоте кристалла и парциональных объемов в невозмущенной системе. Приближенно этот случай реализуется для всех собственных колебаний, для которых длины волн малы по сравнению с линейными размерами малых парциальных объемов. Только для таких собственных колебаний имеет смысл проблема флуктуаций. Из соображений, изложенных в § 1, можно без вычислений предсказать, что вычисление средних квадратов флуктуаций и средних значений всех более высоких степеней флуктуаций в рамках квантовой механики даст те же результаты, что и статистика квантов света Бозе—Энштейна. (Именно эта статистика возникает потому, что и в квантовой механике речь всегда идет только о значениях энергии стационарных состояний[6].) Для случая среднего квадрата флуктуаций вычисления в явном виде приведены в упомянутой выше работе М. Борна, В. Гейзенберга, П. Иордана «К квантовой механике. II».

Приведенные в этой заметке вычисления представляются мне аргументом в пользу того, что континуальная интерпретация квантовомеханического формализма, как и волны де Бройля—Шредингера, не соответствовала бы сущности известных формальных соотношений. Более того, приведенные выше вычисления показывают, что дискретные скачки гармонически вписываются в математическую схему квантовой механики.

---

[5] *Born M., Heisenberg W., Jordan P.* Op. cit.

[6] См. Ibid.

Часть II

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ПОЛЯ

«НАБЛЮДАЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ» В ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ*

*Посвящается проф. Гейгеру
по случаю его 60-летия
30 сентября 1942 г.*

Известные трудности с возникновением расходимостей в теории элементарных частиц указывают на то, что в основы будущей теории будет входить некая постоянная, имеющая размерность длины. Включить такую постоянную непротиворечивым образом в теорию в том виде, как та существует ныне, не представляется возможным. С расчетом на последующие модификации теории в настоящей работе предпринята попытка выделить из системы понятий квантовой теории волновых полей такие понятия, которые, по-видимому, не будут затронуты при перестройке и поэтому войдут в будущую теорию как одна из ее составных частей. Работа подразделяется на следующие части.

I. Наблюдаемые величины и их математическое представление.
- а) Формулировка основных предположений.
- б) Математическое представление наблюдаемых величин.
- в) Сингулярности в импульсном пространстве.
- г) Характеристическая матрица.
- д) Испускание нескольких частиц.

II. Свойства матрицы S.
- а) Общие квантовомеханические свойства матрицы S.
- б) Сингулярная часть матрицы S.
- в) Учет спина и статистики различных элементарных частиц.
- г) Релятивистские свойства матрицы S.

III. Соотношения между наблюдаемыми величинами.
- а) Задача на собственные значения, возникающая в связи с матрицей S.
- б) Соотношения между коэффициентами рассеяния и испускания.
- в) Соотношения между наблюдаемыми величинами, не следующие из общих свойств матрицы S.

В последние годы неоднократно[1)] отмечались трудности, стоящие на пути теории элементарных частиц. Наиболее отчетливо эти трудности проявляются в возникновении расходимостей (бесконечной собственной энергии электрона, бесконечной поляризации вакуума и т. п.), препятствующих созданию математически

* Die «beobachtbaren» Grössen in der Theorie der Elementarteilchen. — Zs. Phys., 1943, **120**, 513–538. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1)] См., например, *Bohr N.* Kongress über Kernphysik in Rom 1931. S. 119; *Weisskopf V.* Zs. Phys., 1934, **89**, 27; *March A.* Zs., Phys., 1936, **104**, 93, 161; 1937, **105**, 620; *Wataghin G.* Zs. Phys., 1934, **88**, 92; 1934, **92**, 547; *Heisenberg W.* Ann. Phys., 1938, **32**, 20.

замкнутой теории и означает, что при описании соответствующего круга явлений решающее значение имеет новая универсальная постоянная с размерностью длины. Пока не известно, какие физические понятия следовало бы развить, чтобы эту постоянную можно было непротиворечивым образом включить в математическую формулировку законов природы и как связаны с новой постоянной, например, массы элементарных частиц.

При таком положении вещей представляется разумным выяснить, какие понятия современной теории могли бы сохраниться и в будущем. Этот вопрос по существу эквивалентен вопросу о том, какие величины «наблюдаемы» в современной теории, так как в будущую теорию прежде всего войдут соотношения между «наблюдаемыми величинами». К сожалению, решить, какие величины «наблюдаемы», может лишь законченная теория. Но и до окончательного завершения теории анализ тех трудностей, с которыми сталкивается ее более ранний вариант, позволяет одни понятия считать непригодными для использования в будущей теории, а другие — никак не связанными с возникающими трудностями. Подобный подход приводит к соотношениям между наблюдаемыми величинами. Эти соотношения не только входят как составная часть в старую теорию, но и, насколько можно судить, войдут в будущую теорию. В настоящей работе предпринята попытка выделить из системы понятий квантовой теории волновых полей такие, которые, несмотря на известные трудности, можно считать принадлежащими будущей теории, как «наблюдаемые физические величины», и вывести соотношения между такими величинами, допускающие, по крайней мере в принципе, экспериментальную проверку.

I

НАБЛЮДАЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ И ИХ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

а) Формулировка основных предположений

Существование «элементарной длины», то есть универсальной постоянной с размерностью длины порядка 10^{-13} см делает проблематичными все утверждения квантовой теории, в которых идет речь о точном установлении места или времени, или, в более общем плане, протекании процесса в пространстве-времени. Хотя за развитием явлений в пространстве-времени заведомо можно наблюдать с высокой степенью точности, все же сомнительно, чтобы положение частицы удалось установить с неопределенностью меньше 10^{-13} см, а время — с неопределенностью меньше $10^{-13}/c \sim 3 \cdot 10^{-24}$ с. В действительности за развитием процессов во времени и в пространстве удается наблюдать лишь с довольно ограниченной точностью.

Кроме того, экспериментальные результаты принято интерпретировать как утверждения об энергиях стационарных состояний или о сечениях взаимодействия при тех или иных процессах столкновений. Уже отсюда следует, что имеется другая категория величин, измерение которых не связано с существованием «наименьшей длины», а именно энергии и импульсы свободных частиц и сечения как меры вероятностей изменения энергии и импульса частицы. Именно такие величины естественно принять за «наблюдаемые» в будущей теории.

Мы подробно рассмотрим следствия из двух предположений о «наблюдаемых величинах»:

1) дискретные значения энергии стационарных состояний замкнутой системы наблюдаемы;

2) в стационарных процессах столкновения, испускания, поглощения и т. д. (например, падающая плоская волна и рассеянная сферическая волна) асимптотическое поведение волновой функции на бесконечности принципиально наблюдаемо.

На первый взгляд кажется, что между двумя разновидностями наблюдаемых величин, задаваемых предположениями 1 и 2, нет внутренней связи, и что для пространственно замкнутой системы с дискретными значениями энергии и незамкнутых процессов столкновения и рассеяния с непрерывным спектром энергии «наблюдаемыми» следует считать совершенно различные величины.

Однако в действительности между обеими разновидностями величин существует весьма тесная взаимосвязь. В качестве примера рассмотрим рассеяния частицы на центральном короткодействующем поле. По предположению 2, наблюдаемыми в этом случае надлежит считать падающую и уходящую волну на бесконечности, то есть, в частности, наблюдаема разность фаз между падающей и уходящей сферической волной с определенной угловой зависимостью (например, при определенном угловом моменте системы). Если рассматриваемую систему на большом расстоянии от центра заключить в сферическую оболочку, то значения энергии системы станут дискретными, но положение уровней энергии будет зависеть только от разности фаз между падающей и уходящей волной. Если значения энергии, измененной введением оболочки системы, считать наблюдаемыми, то разности фаз также необходимо признать наблюдаемыми. Следовательно, в данном случае предположения 1 и 2 утверждают одно и то же.

Предположения 1 и 2 оставляют нерешенным вопрос о том, в какой мере можно считать наблюдаемым пространственное распределение значений собственной функции при малых расстояниях между частицами, образующими систему. Квантовая механика утверждает, что пространственный ход кривой в принципе всегда наблюдаем (с точностью до неопределенной фазовой постоянной волновой функции). Физическое содержание, описываемое пространственным распределением значений волновой функции, будет каким-то образом представлено и в будущей теории. Необходимо лишь учесть, что в будущей теории из принципиальных соображений будет невозможно пренебрегать существованием универсальной длины порядка 10^{-13} см. В этой связи необходимо иметь в виду, что, например, пространственное распределение плотности электронов в атоме можно получить лишь в экспериментах по столкновениям с частицами (электронами или протонами) высокой энергии. Возникающие при этом рассеянные волны заведомо принадлежат к наблюдаемым величинам, однако сомнительно, чтобы по рассеянным волнам можно было бы прийти к какому-нибудь заключению относительно определенного «распределения плотности».

б) Математическое представление наблюдаемых величин

После сделанных нами предварительных замечаний попытаемся теперь выяснить, какое математическое представление допускают величины, отнесенные к числу наблюдаемых, и заодно установить релятивистские свойства соответствующих величин.

Никакой проблемы не возникает в случае дискретных значений энергии замкнутой системы. Эти значения энергии релятивистски инвариантны как массы покоя частиц. Если замкнутая система движется, то ее энергию и импульс можно найти по этим инвариантам и скорости, как обычно, с помощью преобразования Лоренца.

Гораздо более сложные отношения связывают между собой величины, определяющие конечный результат процессов рассеяния или поглощения.

Для простоты рассмотрим сначала столкновение двух элементарных частиц, приводящее к рассеянию или к испусканию новой частицы. Исходное состояние в этом случае описывается, например, плоской волной в координатном пространстве с двумя координатами $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$. Эта «первичная волна» в стационарном состоянии связана с рассеянной волной, которую можно считать произведением плоской волны

в пространстве координат центра масс $(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)/2$ и уходящей волны в пространстве относительных координат $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$. Если при столкновении рождается новая, третья частица (например, фотон), то с первичной волной оказывается связанной еще одна уходящая волна в пространстве трех координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ и $\mathbf{r}_3$. Эту волну также можно представить в виде произведения плоской волны в пространстве координат центра масс и исходящих сферических волн в пространстве координат $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ и $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3$. При этом уходящие волны в пространстве координат $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ и $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3$ связаны между собой так, что в области, где относительная координата $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ мала, волновая функция лишь там существенно отлична от нуля, где относительная координата $\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3$ также мала. Следовательно, рассеянная волна заполняет только часть пространства координат $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$. Физически это подпространство выделено тем условием, что всякий раз, когда какая-то частица оказывается на определенном расстоянии от центра рассеяния, другая частица также оказывается в его окрестности, причем на расстоянии, определяемом отношением скоростей.

Еще одна зависимость между первичными и уходящими волнами следует из законов сохранения энергии и импульса. Если $\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$ — импульсы, $k_1^{0\prime}, k_2^{0\prime}$ — энергии частиц перед столкновением, а $\mathbf{k}''_1, \mathbf{k}''_2$ — импульсы, $k_1^{0\prime\prime}, k_2^{0\prime\prime}$ — энергии частиц после столкновения, то

$$\sum \mathbf{k}'_i = \sum \mathbf{k}''_i, \quad \sum k_i^{0\prime} = \sum k_i^{0\prime\prime}. \tag{1}$$

В дальнейшем мы будем полагать $\hbar = c = 1$, поэтому размерность любой физической величины можно будет представить в виде соответствующей степени длины[2]. Импульс $\mathbf{k}$ и энергия k^0 имеют в этих единицах размерность см$^{-1}$. При обычном квантовомеханическом расчете по теории возмущений первое из условий (1) всегда выполняется автоматически, так как энергия возмущения приводит лишь к таким переходам, при которых выполняется закон сохранения импульса. Наоборот, второе условие выполняется лишь при усреднении по достаточно большим интервалам времени, то есть при соблюдении требований стационарности.

Если падающие и уходящие волны заданы на большом расстоянии от центра рассеяния, то из их асимптотического поведения в пространстве $\mathbf{r}$-координат можно вывести асимптотическое поведение в импульсном пространстве, то есть в пространстве $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$. При этом областям $\mathbf{r}$-пространства, лежащим на больших расстояниях от центра рассеяния, в $\mathbf{k}$-пространстве соответствуют области, в которых выполняются условия (1). Таким образом, асимптотическое поведение волновых функций в $\mathbf{r}$-пространстве однозначно связано с поведением волновой функции в $\mathbf{k}$-пространстве именно там, где выполняются соотношения (1).

в) Сингулярности в импульсном пространстве

Зависимость между асимптотиками волновой функции в координатном и импульсном пространстве заслуживает более подробного математического рассмотрения. В окрестности точек, определяемых условиями (1), собственная функция в импульсном пространстве, соответствующая процессу рассеяния, в определенном смысле сингулярна. Прежде всего, первичную волну можно представить в виде произведения δ-функций Дирака

$$\prod_i \delta(\mathbf{k}'_i - \mathbf{k}''_i),$$

где $\mathbf{k}''_i$ — переменные импульсного пространства, а $\mathbf{k}'_i$ — импульсы, характеризующие соответствующее состояние как константы. С первичной волной связана

[2] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1936, **101**, 533.

рассеянная волна. Как следует из условий (1), рассеянная волна содержит множитель $\delta\left(\sum k_i' - \sum k_i''\right)$. Зависимость от энергий k_i'', задаваемая соотношениями (1), не исчерпывается множителем $\delta\left(k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)$. Как показал Дирак[3], рассеянная волна в импульсном пространстве содержит множитель

$$\frac{1}{\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}} + i\pi\delta\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right).$$

Вид этого множителя определяется условием, согласно которому рассеянная волна должна быть уходящей, а не падающей волной.

Итак, характер особенности собственной функции в тех точках импульсного пространства, где энергия рассеянной частицы равна падающей энергии, требует дополнительного рассмотрения. Прежде всего, ясно, что для асимптотического поведения волн в $\mathbf{r}$-пространстве существенен лишь характер сингулярности, а не ее поведение при конечных значениях $\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}$, так как для асимптотики соотношения (1) выполняются строго. Кроме того, как было показано ранее, множитель Дирака допускает замену множителем

$$\frac{1}{\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)},$$

если дополнительно потребовать, чтобы при интегрировании в $\mathbf{k}$-пространстве при переходе от импульсного пространства к координатному обход особой точки $\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''} = 0$ совершался с определенной стороны вещественной оси (например, по отрицательной мнимой полуплоскости).

Все сказанное можно выразить просто, разложив δ-функцию Дирака на две части следующим образом. Начнем с известного разложения Фурье δ-функции

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikt}\,dt. \tag{2}$$

Пусть

$$\delta_+(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{0}^{\infty} e^{ikt}\,dt, \qquad \delta_-(k) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{0} e^{ikt}\,dt, \tag{3}$$

$$\delta = \delta_+ + \delta_-, \qquad \delta_- = \delta_+^*. \tag{4}$$

Функции δ_+ и δ_- можно представить в виде

$$\begin{aligned} \delta_+(k) &= -\frac{1}{2\pi i k} \quad \text{при} \quad \operatorname{Im}(k) > 0, \\ \delta_-(k) &= \frac{1}{2\pi i k} \quad \text{при} \quad \operatorname{Im}(k) < 0. \end{aligned} \tag{5}$$

Мы утверждаем, что функция $\delta_+\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)$ соответствует множителю Дирака и описывает только уходящие волны, в то время как функция δ_- описывает только

[3] *Dirac P. A. M.* Quantum mechanics. 2nd ed. Oxford, 1935. P. 197.

падающие волны. Убедиться в этом можно непосредственно из интеграла Фурье

$$J_+ = \int d\mathbf{k}'' e^{ik''r} \delta_+(k' - k'') \tag{6}$$

(массой покоя частиц мы для простоты пренебрегаем и поэтому вместо k подставляем k^0). Производя несложные вычисления, получаем

$$J_+ = 2\pi \int_0^\infty dk'' k''^2 \int_{-1}^{+1} d\zeta e^{ik''r\zeta} \delta_+(k' - k'') = \frac{2\pi}{ir} \int_0^\infty dk'' k'' \left(e^{ik''r} - e^{-ik''r}\right) \delta_+(k' - k''). \tag{7}$$

Соотношение (5) позволяет подставить вместо функции $\delta_+(k' - k'')$ величину $-1/(2\pi i)(k' - k'')$, если контур интегрирования в комплексной k''-плоскости выбран так, что особая точка $k'' = k'$ обходится со стороны отрицательной мнимой части. Интервал удобно брать по контуру, отстоящему на некотором конечном расстоянии под вещественной осью. Тогда при достаточно больших r член $e^{-ik''r}$, как нетрудно видеть, исчезает, и остается только член $e^{+ik''r}$. Для вычисления этой части интеграла контур интегрирования следует деформировать так, чтобы он распался на окружность, содержащую внутри себя особую точку $k'' = k'$, и некоторый путь над вещественной осью. При больших r последнее слагаемое не дает вклада в J_+, так как величина $e^{ik''r}$ может быть всюду сколь угодно малой, поэтому весь интеграл сводится к интегралу по окружности, охватывающей особую точку, и мы получаем

$$J_+ = -\frac{2\pi i}{r} k' e^{ik'r}, \tag{8}$$

т. е. только уходящую волну.

Аналогичным образом можно получить, что

$$J_- = \int d\mathbf{k}'' e^{ik''r} \delta_-(k' - k'') = \frac{2\pi i}{r} k' e^{-ik'r}, \tag{9}$$

т. е. падающая волна. (Выбранные нами представления $e^{-ik'r}$ и $e^{+ik'r}$, соответственно, для падающей и уходящей волн предполагают, что временная зависимость волновой функции имеет, как обычно, вид e^{-ik^0t}.)

Функции (3) позволяют сравнительно просто описать поведение рассеянных волн в импульсном пространстве. Волновая функция содержит для рассеянной волны множитель

$$\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right) \delta_+\left(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime}\right).$$

Этот множитель, как следует непосредственно из соотношений (2) и (3), релятивистски инвариантен так же, как и произведения

$$\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right) \delta_-\left(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime}\right)$$

и

$$\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right) \delta\left(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime}\right).$$

Разложение (4) позволяет также выделить в первичной волне

$$\prod_i \delta(\mathbf{k}_i' - \mathbf{k}_i''),$$

представимой в виде

$$\prod_i \delta(\mathbf{k}'_i - \mathbf{k}''_i) = \delta\left(\sum \mathbf{k}'_i - \sum \mathbf{k}''_i\right)\delta\left(k_i^{0\prime} - k_i^{0\prime\prime}\right)\Delta\left(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i\right), \qquad (10)$$

падающую и уходящую компоненты. Множитель Δ по существу является δ-функцией, т. е. единичной матрицей по переменным, которые остаются, если четыре из переменных $\mathbf{k}''_i$ исключить с помощью полной энергии и полного импульса. Для этого разложения необходимо лишь разложить $\delta\left(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime}\right)$ в (10) на $\delta_+ + \delta_-$.

г) Характеристическая матрица

После сделанных нами предварительных замечаний можно высказать следующее утверждение: первичной волне $\prod_i \delta(\mathbf{k}'_i - \mathbf{k}''_i)$ соответствует асимптотическое выражение волновой функции в $\mathbf{k}''$-пространстве, распадающееся на

падающую волну

$$\delta\left(\sum \mathbf{k}'_i - \sum \mathbf{k}''_i\right)\delta_-\left(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime}\right)\Delta\left(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i\right)$$

и уходящую волну $\qquad (11)$

$$\delta\left(\sum \mathbf{k}'_i - \sum \mathbf{k}''_i\right)\delta_+\left(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime}\right)\left[\Delta\left(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i\right) + R\left(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i\right)\right].$$

Ясно, что функция $R(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i)$ описывает собственно рассеянную волну. Если рассеяние сопровождается испусканием новых частиц, то функция R распадается на несколько функций, из которых первая зависит только от $\mathbf{k}''_1$ и $\mathbf{k}''_2$, вторая — от $\mathbf{k}''_1$, $\mathbf{k}''_2$ и $\mathbf{k}''_3$, третья — от $\mathbf{k}''_1$, $\mathbf{k}''_2$, $\mathbf{k}''_3$ и $\mathbf{k}''_4$ и т. д. Составим из матриц Δ и R новую матрицу

$$S(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i) = \Delta(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i) + R(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i) \qquad (12)$$

и назовем $S(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i)$ характеристической матрицей задачи рассеяния. До сих пор мы рассматривали лишь первую часть этой матрицы, зависящую лишь от двух переменных $\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i$. Общий вид матрицы S схематически можно представить следующим образом:

	$\mathbf{k}''_1\mathbf{k}''_2$	$\mathbf{k}''_1\mathbf{k}''_2\mathbf{k}''_3$	$\mathbf{k}''_1\mathbf{k}''_2\mathbf{k}''_3\mathbf{k}''_4$	...
$\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2$				
$\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2\mathbf{k}'_3$				
$\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2\mathbf{k}'_3\mathbf{k}'_4$				

(12a)

Из асимптотического разложения (11) следует, что матричные элементы определены лишь для переходов, удовлетворяющих условиям (1), т. е. для переходов, при которых сохраняются энергия и импульс.

Матрица $S(\mathbf{k}'_i, \mathbf{k}''_i)$ *содержит математическое описание величин, которые в предположении* (2) *можно назвать наблюдаемыми.*

д) Испускание нескольких частиц

Прежде чем мы перейдем к подробному обсуждению свойств матрицы S, необходимо еще показать, что та часть матрицы, которая зависит более чем от двух переменных $\mathbf{k}''_i$, может правильно представлять уходящие волны. Соображения Дирака и соотношения (2)–(9) относятся главным образом к простому процессу

рассеяния, а не к испусканию новых частиц. Чтобы учесть испускание новых частиц, мы рассмотрим интеграл Фурье вида ($\mathbf{K}$ — полный импульс, K^0 — полная энергия)

$$J_+ = \int d\mathbf{k}_1 \dots d\mathbf{k}_f \exp\left\{i \sum_l \mathbf{k}_l \mathbf{r}_l\right\} \delta\left(\mathbf{K} - \sum \mathbf{k}_l\right) \delta_+\left(K^0 - \sum k_l^0\right) g(\mathbf{k}_l). \tag{13}$$

От первой δ-функции мы можем избавиться, интегрируя по k_1 ($\varkappa$ — масса покоя частицы в см$^{-1}$):

$$J_+ = \int d\mathbf{k}_2 \dots d\mathbf{k}_f \exp\left\{i \sum_{l=2}^{f} \mathbf{k}_l(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_1) + i\mathbf{K}\mathbf{r}_1\right\} \times$$
$$\times \delta_+\left(K^0 - \sqrt{\varkappa^2 + \left(\mathbf{K} - \sum_{l=2}^{f} \mathbf{k}_l\right)^2} - \sum_{l=2}^{f} k_l^0\right) g\left(\mathbf{K} - \sum_{l=2}^{f} \mathbf{k}_l, \mathbf{k}_2 \dots\right). \tag{14}$$

Если в пространстве $\mathbf{k}_2$ ввести, как в (7), полярные координаты, выбрав за полярную ось направление $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$, и обозначить $(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)/|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ через $\mathbf{e}$, то, с учетом соотношения (17), соответствующего принятым нами соглашениям, мы получим при интегрировании по $\mathbf{k}_2$

$$J_+ = 2\pi i \int d\mathbf{k}_3 \dots d\mathbf{k}_f \frac{\bar{k}_2}{\mathbf{e}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|} \times$$
$$\times \exp\left\{i\bar{k}_2|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| + i \sum_{l=3}^{f} \mathbf{k}_l(\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_1) + i\mathbf{K}\mathbf{r}_1\right\} g\left(\mathbf{K} - \bar{\mathbf{k}}_2\mathbf{e} - \sum_{l=3}^{f} \mathbf{k}_l, \dots\right), \tag{15}$$

где $\bar{k}_2$ — значение $\mathbf{k}_2$, удовлетворяющее при заданных значениях $\mathbf{k}_3, \dots, \mathbf{k}_f$ закону сохранения энергии, т. е. обращающее в нуль аргумент δ-функции; $\mathbf{v}_1$ и $\mathbf{v}_2$ — скорости частиц 1 и 2 (в единицах скорости света), вытекающие из законов сохранения. Эти величины зависят от $\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \dots, \mathbf{k}_f$. Поскольку интегрирование теперь должно производиться только по $\mathbf{k}_3, \dots, \mathbf{k}_f$, то при больших $|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_1|$ значение интеграла существенно отлично от нуля лишь там, где производные от экспоненты по $\mathbf{k}_3, \dots, \mathbf{k}_f$ обращаются в нуль. Но тогда функция g с увеличением $\mathbf{k}_i$ быстро изменялась, что заранее исключено.

Аргумент δ_+-функции имеет вид

$$A = K^0 - \sqrt{\varkappa^2 + \left(\mathbf{K} - k_2\mathbf{e} - \sum_{l=3}^{f} \mathbf{k}_l\right)^2} - \sqrt{\varkappa^2 + k_2^2} - k_3^0 - \dots - k_f^0, \tag{16}$$

поэтому (при постоянном направлении $\mathbf{e}$) полный дифференциал dA можно представить в виде

$$dA = dk_2\mathbf{e}(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) + \sum_{l=3}^{f} d\mathbf{k}_l(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_l), \tag{17}$$

где $\mathbf{v}_i = \mathbf{k}_i/\mathbf{k}_i^0$ — скорости частиц (в единицах скорости света). При дифференцировании экспоненты в (15) мы получаем из (15) и (17), что член, пропорциональный $d\mathbf{k}_l$, имеет вид

$$i\, d\mathbf{k}_l\left[\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_1 + \frac{\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_1}{\mathbf{e}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)}|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|\right]. \tag{18}$$

Это означает, что волновая функция заметно отлична от нуля лишь там, где расстояния $|\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_1|$ и $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ ведут себя, как соответствующие им скорости $|\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_1|$ и $|\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1|$.

Именно такого поведения следует ожидать из физических соображений, так как при рассеянии все частицы возникают одновременно, о чем уже говорилось ранее (раздел Iб). Отсюда следует, что те части матрицы S, которые соответствуют испусканию нескольких частиц, вместе с множителем $\delta(\sum \mathbf{k}'_i - \sum \mathbf{k}''_i)\delta_+(\sum \mathbf{k}^{0\prime}_i - \sum \mathbf{k}^{0\prime\prime}_i)$ правильно передают асимптотическое поведение волновой функции в координатном пространстве.

II

СВОЙСТВА МАТРИЦЫ $S(\mathrm{K}'_I, \mathrm{K}''_I)$

а) Общие квантовомеханические свойства матрицы S

Матрица S описывает только переходы между состояниями с равной энергией и равными импульсами. Следовательно, она разлагается на бесконечно много подматриц, каждая из которых соответствует определенным значениям полной энергии и полного импульса.

Матрица S унитарна, т. е. удовлетворяет матричному равенству

$$\widetilde{S}^* S = 1 \tag{19}$$

(знак $\tilde{}$ означает перестановку столбцов и строк).

Последнее утверждение можно обосновать следующим образом. Рассмотрим, например, собственную функцию в $\mathbf{k}''$-пространстве, соответствующую заданной первичной волне:

$$\psi_{\mathbf{k}'_1\ldots\mathbf{k}'_f}(\mathbf{k}''_1, \ldots, \mathbf{k}''_f). \tag{20}$$

Эта функция удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\int (\mathbf{k}''_l|H|\mathbf{k}'''_l)\, d\mathbf{k}'''_1 \ldots d\mathbf{k}'''_f \psi(\mathbf{k}'''_l) = \Big(\sum_l k^{0\prime}_l\Big)\psi(k_l''), \tag{21}$$

а ее сингулярная часть представлена выражениями (11).

Решение (20) волнового уравнения можно также вывести из первичной волны (10) с помощью уравнения Шредингера, зависящего от времени, так как при включении взаимодействия между частицами, например, при $t = 0$, первичная волна при $t = \infty$ переходит в решение (20):

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}'_1\ldots\mathbf{k}'_f}(\mathbf{k}''_1,\ldots,\mathbf{k}''_f) &= \lim_{t\to\infty} \exp\Big\{i\sum k^{0\prime}_l t\Big\}\int (\mathbf{k}''|e^{-iHt}|\mathbf{k}''')\, d\mathbf{k}'''_1\ldots d\mathbf{k}'''_f \prod \delta(\mathbf{k}'_i - \mathbf{k}'''_i) = \\ &= \lim_{t\to\infty} \exp\Big\{i\sum k^0_i t\Big\}(\mathbf{k}''|e^{-iHt}|\mathbf{k}'). \end{aligned}\tag{22}$$

Решение уравнения (21) (отличное от решения (20)) мы получим, изменив в (22) знак времени:

$$\varphi_{\mathbf{k}'_1\ldots\mathbf{k}'_f}(\mathbf{k}''_1, \ldots, \mathbf{k}''_f) = \lim_{t\to\infty} \exp\Big\{-i\sum k^{0\prime}_l t\Big\}\Big(\mathbf{k}''\Big|e^{+iHt}\Big|\mathbf{k}'\Big). \tag{23}$$

В силу эрмитова характера гамильтониана H второе решение (23) получается из первого решения (22), если над (22) произвести операцию комплексного

сопряжения и перестановки переменных $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}''$ (не переставляя при этом $k^{0'}$ и k^0 в сингулярных членах):

$$\lim_{t\to\infty} \exp\left\{-i\sum k_l^{0'}t\right\}\left(\mathbf{k}'|e^{iH^*t}|\mathbf{k}''\right) = \lim_{t\to\infty} \exp\left\{-\sum k_l^{0'}t\right\}\left(\mathbf{k}''|e^{iHt}|\mathbf{k}'\right) = \varphi. \quad (24)$$

Наконец, из (4), (11) и (24) получаем для сингулярной части

$$\begin{aligned}
&\text{из } \psi: \\
&\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right)\delta_-\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)\Delta(\mathbf{k}', \mathbf{k}'') + \\
&\quad + \delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right)\delta_+ + \left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)S(\mathbf{k}', \mathbf{k}''); \\
&\text{из } \varphi: \\
&\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right)\delta_+\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)\Delta^*(\mathbf{k}'', \mathbf{k}') + \\
&\quad + \delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right)\delta_-\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)S^*(\mathbf{k}'', \mathbf{k}').
\end{aligned} \quad (25)$$

Вместо импульсов отдельных частиц в качестве новых переменных удобно ввести полный импульс $\mathbf{K}$, полную энергию K^0 и $3f-4$ остальных координат $x_5, \ldots, x_{3f}$. Матрица S при этом распадается на подматрицы, соответствующие лишь определенным значениям K^0 и $\mathbf{K}$:

$$S = S\left(\mathbf{K}', K^{0'}; x', x''\right) = S(x', x''). \quad (26)$$

То же справедливо и относительно матрицы Δ, которую надлежит рассматривать просто как единичную матрицу по переменным x:

$$\Delta(x', x'') = (x'|1|x'').$$

Подставив теперь во второй строке (25) вместо $\mathbf{k}_i'$ величины $\mathbf{K}$, K^0, x', заменив x' на x''', умножив на $S(x', x''')$ и проинтегрировав по всем x''', мы должны снова получить некое решение волнового уравнения (21), так как сумма его решений также есть решение. Для сингулярной части интегрирование дает:

$$\int \varphi_{\mathbf{K}', K^0, x'''}\, dx''' S(x', x'''):$$

$$\delta\left(K^{0'} - K^{0''}\right)S(x', x'') + \delta\left(\mathbf{K}' - \mathbf{K}''\right)\delta_-\left(K^{0'} - K^{0''}\right)\int S^*(x'', x''')\,dx''' S(x', x'''). \quad (27)$$

Построенное таким образом решение порождает такую же уходящую волну, как и ψ. Следовательно, оно должно порождать и такую же падающую волну, какую порождает ψ. Таким образом, мы получаем соотношение

$$\int dx''' S^*(x'', x''')S(x', x''') = \Delta(x', x''), \quad (28)$$

или в матричном виде

$$S\widetilde{S}^* = 1 = \widetilde{S}^* S. \quad (29)$$

Тем самым унитарность матрицы S доказана. Если функция Гамильтона H как матрица не только эрмитова, но и вещественна, то не только H, но и, как видно из (22), ψ, а значит и $S(\mathbf{k}', \mathbf{k}'')$ — симметричная матрица.

Из $H = \widetilde{H}$ следует также, что

$$S = \widetilde{S}. \tag{30}$$

При этих специальных предположениях выполняется матричное соотношение

$$S^* S = 1. \tag{31}$$

б) Сингулярная часть матрицы S

Матрица S не является регулярной функцией переменных $\mathbf{k}'$ и $\mathbf{k}''$: как следует из соотношения (12)

$$S = 1 + R,$$

матрица S обладает δ-образной частью. Определением этой сингулярной части матрицы S мы сейчас и займемся.

Хотя не существует простого способа, который бы позволил учесть, что $3f-4$ переменных x симметрично зависят от импульсов различных частиц, это не приводит к каким-либо формальным затруднениям. Во-первых, можно отказаться от симметрии и, например, исключить три координаты импульса $\mathbf{k}_1$ первой частицы и энергию k_2^0 второй частицы, воспользовавшись для этого полной энергией и полным импульсом. В этом случае в качестве переменных x удобно выбрать единичный вектор в направлении $\mathbf{k}_2$: $\mathbf{e}_2 = \mathbf{k}_2/k_2$ и импульсы $\mathbf{k}_3, \ldots, \mathbf{k}_f$. Но можно поступить иначе: несколько обобщить матрицу S, умножив ее на $\delta(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i'')\delta(\sum k_i^{0\prime} - \sum k_i^{0\prime\prime})$. Обобщенную таким образом матрицу S можно представить в виде, симметричном по всем переменным $\mathbf{k}_1, \ldots, \mathbf{k}_f$ (поскольку нарушает симметрию не физическое различие между частицами), для этого и приходится тащить за собой выписанный нами δ-образный множитель.

Примем сначала первую альтернативу и исследуем свойства отдельных подматриц матрицы S, которым в представлении (12а) соответствуют клетки. Первая строка матрицы (12а) отвечает всем процессам рассеяния, в которых сталкиваются две частицы и происходит либо рассеяние, либо рассеяние и испускание новых частиц.

Направление $\mathbf{e}_2$ можно задать двумя углами θ и φ, причем должны выполняться соотношения

$$d\mathbf{e}_2 = \sin\theta\, d\theta\, d\varphi, \quad d\mathbf{k}_2 = de\, k_2 k_2^0\, dk_2^0. \tag{32}$$

Кроме того, можно написать, что

$$\Delta(\mathbf{e}_2', \mathbf{e}_2'') = \Delta(\mathbf{e}_2' - \mathbf{e}_2''). \tag{33}$$

Для первой строки матрицы S в (12а) получаем следующее представление:

	$\mathbf{e}_2''$	$\mathbf{e}_2''\mathbf{k}_3''$	$\mathbf{e}_2''\mathbf{k}_3''\mathbf{k}_4''$
$\mathbf{e}_2'$	$\Delta(\mathbf{e}_2' - \mathbf{e}_2'') + f(\mathbf{e}_2', \mathbf{e}_2''; \mathbf{K}', K^{0\prime})$	$g(\mathbf{e}_2', \mathbf{e}_2'', \mathbf{k}_3''; \mathbf{K}', K^{0\prime})$	$h(\mathbf{e}_2', \mathbf{e}_2'', \mathbf{k}_3'', \mathbf{k}_4''; \mathbf{K}', K^{0\prime})$
$\mathbf{e}_2'\mathbf{k}_3'$	...	...	...
...	...	...	...

Первая клетка в первой строке соответствует двум направлениям $\mathbf{e}_2'$ и $\mathbf{e}_2''$. Нерассеянная проходящая волна представлена слагаемым Δ. Второе слагаемое описывает рассеянную волну. Функция $f(\mathbf{e}_2', \mathbf{e}_2''; \mathbf{K}', K_0')$ в общем случае не сингулярна. В специальной системе координат, в которой центр масс покоится, т.е. $\mathbf{K}' = 0$, функция f вследствие изотропии пространства зависит только от $|\mathbf{e}_2' - \mathbf{e}_2''|$, или, что то же, от скалярного произведения $(\mathbf{e}_2'\mathbf{e}_2'')$. Если положить

$$(\mathbf{e}_2'\mathbf{e}_2'') = \zeta = \cos\theta' \cos\theta'' + \sin\theta' \sin\theta'' \cos(\varphi' - \varphi''), \tag{34}$$

то в системе центра масс можно поэтому записать

$$f = f(\zeta, K^{0\prime}), \tag{35}$$

т. е. в системе центра масс амплитуда рассеянной волны зависит только от угла относительно первоначального на правления и энергии налетающих частиц. Столь же просто выглядят соотношения и в системе координат, в которых одна из первичных частиц покоится, например, $\mathbf{k}'_1 = 0$. В этом случае в качестве полярной оси удобно выбрать направление вектора $\mathbf{K}'$, тогда $\theta' = 0$ и

$$f = f(\theta'', K^{0\prime}). \tag{36}$$

Функции g, h и т. д. в общем случае также не сингулярны. В системе центра масс они зависят от относительного положения различных векторов $\mathbf{e}'_2, \mathbf{e}''_3, \mathbf{k}''_3, \mathbf{k}''_4$ и т. д., поэтому их невозможно выразить только через $\zeta, \mathbf{k}''_3, \mathbf{k}''_4$.

Функции f, g, h весьма просто связаны с сечениями процессов рассеяния и испускания. С точностью до нормировочных множителей, зависящих от фазовых обменов соответствующих областей в пространстве состояний эти нормировочные множители определяются абсолютными величинами квадратов функций f, g, h.

Как показывает простой расчет, из (15) и (17) следует, что при $\mathbf{k}'_1 = 0$ сечение $dQ_{\text{расс}}$ рассеяния в интервале $d\mathbf{e}''_2$ по углу имеет величину

$$dQ_{\text{расс}} = (2\pi)^2 \frac{k_2^{0\prime} k_3''^3}{k'_2 k_2^{0\prime\prime} |\mathbf{v}''_2 - \mathbf{v}''_1|^2} |f^2|\, d\mathbf{e}''_2, \tag{37а}$$

а сечение $dQ_{\text{расс,исп}}$ для рассеяния в интервале $d\mathbf{e}''_2$ и испускания частиц в интервале $d\mathbf{k}''_3$ импульсного пространства — величину

$$dQ_{\text{расс,исп}} = (2\pi)^5 \frac{k_2^{0\prime} k_2''^3}{k'_2 k_2^{0\prime\prime} |\mathbf{v}''_2 - \mathbf{v}''_1|^2} |g^2|\, d\mathbf{e}''_2\, d\mathbf{k}''_3 \tag{37б}$$

и т. д. Значения $\mathbf{v}''_1, \mathbf{v}''_2, \mathbf{k}''_2, k_2^{0\prime\prime}$ в этих формулах следует брать из законов сохранения энергии и импульса. (Как и в (17), скорости $\mathbf{v}$ измеряются в единицах скорости света.)

Вторая строка матрицы S в представлении (12а) соответствует процессам, в которых первоначально в качестве плоских волн имеются *три* частицы. В этом случае с подавляющей частотой в процессе рассеяния участвуют лишь *две* из трех частиц, а третья пролетает, не испытывая возмущений, подобно тому, как в случае *двух* частиц с подавляющей частотой рассеяния рассеяния вообще не происходит. Вторая строка матрицы (12а) содержит поэтому сингулярную часть, имеющую вид произведения первой строки и некоторой δ-функции относительно третьей частицы: $\delta(\mathbf{k}'_3 - \mathbf{k}''_3)$. Поскольку ни одна из трех частиц не выделена по сравнению с остальными, во второй строке матрицы (12а) должны стоять три сингулярных члена такого типа, возникающих из первого члена при перестановке частиц. С формальной точки зрения эти члены были бы безразличны, поскольку в используемом нами представлении три частицы формально считаются различными. Эти члены мы будем обозначать так: « + перест.». Итак, мы приходим к следующему представлению

матрицы S:

	$\mathbf{e}_2''$	$\mathbf{e}_2''\mathbf{k}_3''$	$\mathbf{e}_2''\mathbf{k}_3''\mathbf{k}_4''$
$\mathbf{e}_2'$	$\Delta(\mathbf{e}_2'-\mathbf{e}_2'')+f(\mathbf{e}_2'\mathbf{e}_2'';K',K^{0'})$	$g(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'';K',K^{0'})$	$h(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'',\mathbf{k}_4'';K',K^{0'})$
$\mathbf{e}_2'\mathbf{k}_3'$	$g(\mathbf{e}_2',\mathbf{k}_3',\mathbf{e}_2'';K',K^{0'})$	$\Delta(\mathbf{e}_2'-\mathbf{e}_2'')\delta(\mathbf{k}_3'-\mathbf{k}_3'')+$ $+\delta(\mathbf{k}_3'-\mathbf{k}_3'')f(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'';K',K^{0'})+$ +перест.+$F(\mathbf{e}_2',\mathbf{k}_3',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'';K',K^{0'})$	$\delta(\mathbf{k}_3'-\mathbf{k}_3'')g(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_4'';K',K^{0'})+$ +перест.+ $+G(\mathbf{e}_2',\mathbf{k}_3',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'',\mathbf{k}_4'';K',K_0')$
$\mathbf{e}_2'\mathbf{k}_3'\mathbf{k}_4'$	...	...	...

(38)

Функции F и G в общем случае не сингулярны. Абсолютные величины их квадратов (как и прежде, с точностью до фазовых множителей) определяют сечения процессов, в которых существенно участвуют три первичные частицы.

Дальнейшее обобщение приведенных нами соображений на другие строки матрицы S очевидно: каждая строка содержит сингулярную часть, которая получается при умножении строк, соответствующих меньшему числу частиц, на δ-функции.

в) Учет спина и статистики различных элементарных частиц

В основе представления (12а) лежит простое предположение о том, что имеется всего лишь один сорт частиц и состояние каждой частицы полностью описывается импульсом $\mathbf{k}$. Однако в общем случае приходится иметь дело с частицами различных сортов, состояние которых полностью описывается только заданием импульса и направления спина. Распространить представление (12а) на этот общий случай не составляет труда: необходимо учесть независимо от числа частиц и направления спина все состояния с заданным значением полной энергии и полного импульса. Каждому такому состоянию соответствует одна строка и один столбец матрицы S.

В зависимости от того, какой статистике — Ферми или Бозе, подчиняются частицы отдельных сортов, матрица S должна быть либо антисимметричной, либо симметричной относительно перестановки координат частиц, причем это замечание остается в силе для перестановки переменных как с одним, так и с двумя штрихами. (Перестановка переменных с одним и двумя штрихами не принадлежит к числу операций, относительно которых следует ожидать свойств симметрии.) Это означает, что вместо δ-функций в представление, например, первичных волн или в матрице S должны входить симметризованные и антисимметризованные δ-функции. Эти соображения столь хорошо известны из обычной квантовой механики, что более подробное изложение их было бы излишним.

г) Релятивистские свойства матрицы S

Если обобщить матрицу S, включив в нее релятивистски инвариантный множитель $\delta(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i'')\delta(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''})$, то получится матрица, содержащая в качестве наибольшего слагаемого единичную матрицу $(\mathbf{k}'|1|\mathbf{k}'')$ и переходящая в единичную матрицу, когда взаимодействие исчезает. Отсюда следует, что матрица S преобразуется релятивистски, как единичная матрица. Однако это не означает, что каждый матричный элемент $(\mathbf{k}'|S|\mathbf{k}'')$ ведет себя, как релятивистский инвариант, составленный из импульсов начального и конечного состояний, так как в случае единичной матрицы инвариантным должен быть не матричный элемент, а интеграл

$$\int (\mathbf{k}'|1|\mathbf{k}'')\, d\mathbf{k}_1'' \ldots = 1. \tag{39}$$

Дифференциал dk_i релятивистски не инвариантен. Вопрос о ковариантных свойствах матричных элементов решается весьма просто, если учесть, что выражение

$$\frac{d\mathbf{k}_i}{k_i^0} = \frac{d\mathbf{k}_{ix}\, d\mathbf{k}_{iy}\, d\mathbf{k}_{iz}}{k_i^0} \tag{40}$$

инвариантно относительно преобразований Лоренца. Следовательно, релятивистски инвариантный интеграл мы получим, потребовав, чтобы каждый матричный элемент имел вид

$$(\mathbf{k}_1' \ldots \mathbf{k}_l' | S | \mathbf{k}_1'' \ldots \mathbf{k}_m'') = \frac{\text{инвариантное выражение из } \mathbf{k}' \text{ и } \mathbf{k}''}{\sqrt{k_1^{0\prime} \ldots k_i^{0\prime} k_1^{0\prime\prime} \ldots k_m^{0\prime\prime}}} \tag{41}$$

Нормировочный множитель в знаменателе обеспечивает появление инвариантных величин $\prod d\mathbf{k}_i/k_i^0$, например, при интегрировании по $\prod d\mathbf{k}_i$, которое производится при умножении двух таких матриц.

Если матричный элемент зависит не только от импульсов, но и от направлений спинов частиц, то в числителе правой части в (41) стоит соответствующее ковариантное спинорное выражение. Следовательно, при суммировании по направлениям спинов вопрос об инвариантных свойствах, аналогичный рассмотренному нами в случае дифференциинвариантных свойств, вообще не возникает.

Таким образом, равенство (41) содержит полный ответ на вопрос о релятивистских свойствах матрицы S.

III
СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ НАБЛЮДАЕМЫМИ ВЕЛИЧИНАМИ

а) Задача на собственные значения, возникающая в связи с матрицей S

В общем случае унитарная матрица не приводит ни к какой задаче на собственные значения, так как строки и столбцы такой матрицы связывают различные состояния и поэтому само понятие диагональной матрицы утрачивает смысл. Кроме того, в общем случае число строк не совпадает с числом столбцов. Однако матрица S обладает отличительной особенностью: ее строки и столбцы допускают упорядочение по *одной и той же* последовательности состояний с тем лишь различием, что строки относятся к падающим, а столбцы — к уходящим волнам. Следовательно, матрица S порождает задачу на собственные значения, так как эту матрицу можно привести к диагональному виду. Если матрица S приводима к диагональному виду, то физически это означает, что в соответствующем стационарном процессе рассеяния падающие волны с точностью до фаз совпадают с уходящими волнами.

Итак, с физической точки зрения решение задачи на собственные значения для матрицы S сводится к следующей задаче: требуется найти такую комбинацию падающих плоских волн, принадлежащих одному и тому же значению полного импульса $\mathbf{K}$ и полной энергии K^0, чтобы возникающий при суперпозиции волновой процесс на входе с точностью до фазы совпадал с волновым процессом на выходе. В силу унитарности матрицы S ее соответствующее собственное значение равно по абсолютной величине 1 и представляет собой фазовый множитель между уходящей и падающей волной.

Если все переменные, характеризующие состояние, кроме $\mathbf{K}$ и K^0 обозначить, как в разделе IIа, просто через x, то задачу на собственные значения математически можно сформулировать следующим образом: требуется найти функцию

преобразования (или «функцию Шредингера») переменных x', соответствующую стационарному процессу η':

$$g(\mathbf{K}', K^{0'}; \eta', x') = g(\eta', x'). \tag{42}$$

Сингулярная часть падающей и уходящей волны имеет в этом случае вид

$$\delta(\mathbf{K}'-\mathbf{K}'')\delta(K^{0'}-K^{0''})g(\eta',x'')+\delta(\mathbf{K}'-\mathbf{K}'')\delta_+(K^{0'}-K^{0''})\int g(\eta',x')dx'S(x',x''). \tag{43}$$

Требование о совпадении с точностью до фазового множителя $S_{\eta''}$ падающей волны с уходящей волной приводит, таким образом, к уравнению преобразования

$$\int g(\eta', x')\, dx' S(x', x'') = S_{\eta'} g(\eta', x''). \tag{44}$$

Так как $\widetilde{S}^* S = 1$, то $|S_{\eta'}|^2 = 1$, и мы можем положить

$$S_{\eta'} = e^{i\eta'}, \tag{45}$$

т. е. значение η' фазы можно использовать для нормировки состояний.

Задача на собственные значения (44) допускает особенно простое решение, если первая строка матрицы S описывает чистый процесс рассеяния частиц без спина, т. е. если при соответствующих значениях энергии-импульса не следует ожидать испускания новых частиц. В этом случае в первой строке матрицы (12а) отлична от нуля только первая клетка, а такая подматрица, очевидно, приводима к диагональному виду. Для этого достаточно в системе центра масс в качестве переменных вместо импульсов $\mathbf{k}_1', \mathbf{k}_2', \ldots$ или углов, задающих направление $\mathbf{e}_2'$, ввести моменты импульсов. Тогда соответствующие собственные функции $g(K', K^{0'}; \eta', x')$ по существу станут сферическими функциями направления $\mathbf{e}_2'$ в системе центра масс. В силу закона сохранения момента импульса переходы происходят только в состояния с тем же моментом импульса, следовательно, в системе координат сферических функций матрица S имеет диагональный вид. Задача на собственные значения (44) в этом простейшем случае сводится к известному методу определения сечения рассеяния: разложения плоских волн по сферическим функциям и определения соотношения между фазами падающей и уходящей волны для отдельных сферических волн.

Из этого частного случая видно, что матрица S, как в рассмотренном нами, так и в более общих случаях, обладает *дискретными* собственными значениями. Ответ на вопрос о том, может ли и при каких условиях матрица S обладать непрерывным спектром собственных значений, станет возможным лишь после того, как будет подробно исследована взаимосвязь между функцией Гамильтона и функцией S.

Как и в обычной квантовой механике, система нормированных собственных функций $g(\mathbf{K}', K^{0'}; \eta', x')$ образует унитарную матрицу. Чтобы доказать это, выпишем прежде всего уравнение, комплексно-сопряженное уравнению (44) (аргументы $\mathbf{K}', K^{0'}$, зависимость от которых самоочевидна, мы для краткости опустим)

$$\int g^*(\eta', x')\, dx' S(x', x'') = S^*_{\eta'} g^*(\eta', x''), \tag{46}$$

после чего переставим x' и x'' и воспользуемся соотношением $\widetilde{S}^* S = 1$:

$$\int g^*(\eta', x'')\, dx'' S^{-1}(x', x'') = S^*_{\eta'} g^*(\eta', x'). \tag{47}$$

Умножив затем на матрицу S и $S_{\eta'}$, получим с учетом того, что $S^*_{\eta'}S_{\eta'} = 1$,

$$g^*(\eta', x')S_{\eta'} = \int S(x', x'')\,dx''g^*(\eta', x''). \tag{48}$$

Заменив в уравнении (48) η' на η'', умножим его на $g(\eta', x')$ и проинтегрируем по всем x', а уравнение (44) умножим на $g^*(\eta'', x'')$ и проинтегрируем по x''. В результате этих операций из (44) и (48) мы получим два уравнения

$$\begin{aligned}\int g(\eta', x')\,dx'S(x', x'')\,dx''g^*(\eta'', x'') &= S_{\eta'}\int g(\eta', x')\,dx'g^*(\eta'', x'),\\ \int g(\eta', x')\,dx'S(x', x'')\,dx''g^*(\eta'', x'') &= S_{\eta''}\int g(\eta', x')\,dx'g^*(\eta'', x').\end{aligned} \tag{49}$$

Вычитая из первого уравнения второе, мы приходим к соотношению, из которого, как обычно, следует ортогональность собственных функций $g(\eta', x')$. Условие нормировки

$$\int g^*(\eta', x')g(\eta', x')\,dx' = 1 \tag{50}$$

приводит к соотношению

$$\tilde{g}^*g = 1. \tag{51}$$

Итак, g обладает всеми свойствами обычной матрицы преобразования. Следовательно, можно построить эрмитову матрицу фазы η':

$$(x'|\eta|x'') = \sum_{\eta'} g(\eta', x')\eta'g^*(\eta', x'''). \tag{52}$$

Эрмитова матрица η связана с матрицей S простым соотношением

$$S = e^{i\eta}. \tag{53}$$

Итак, «наблюдаемые величины», т. е. всю совокупность процессов рассеяний и испускания частиц можно описывать не унитарной матрицей S, а эрмитовой матрицей η, причем значения η и $\eta + 2\pi n$ (где n — любое целое число) следует считать эквивалентными. Эрмитова матрица η служит полноценной заменой функции Гамильтона, если мы ограничимся рассмотрением величин, которые были названы нами «наблюдаемыми», но содержит меньше информации, чем функция Гамильтона, так как функция Гамильтона в принципе определяет весь пространственно-временной ход собственных функций, в то время как матрица η определяет поведение волновых функций на бесконечности.

б) Соотношения между коэффициентами рассеяния и испускания

Отдельные элементы матрицы S в представлении (38) задают меру вероятности соответствующих процессов рассеяния и испускания, абсолютные величины их квадратов связаны с сечениями соотношениями типа (37). Но элементы матрицы S не являются независимыми. Их нельзя выбирать независимо и в том случае, если задана функция Гамильтона, поскольку элементы матрицы S должны удовлетворять ограничению — условию $\widetilde{S}^*S = 1$.

Это матричное условие порождает целый ряд соотношений между матричными элементами. Для вывода их выражение $\widetilde{S}^*S$ целесообразно разложить на составные части с помощью представления (38). Опуская аргументы $\mathbf{K}'$, $K^{0'}$, получаем

	$\mathbf{e}_2''$	$\mathbf{e}_2''\mathbf{k}_3''$
e_2'	$\Delta(\mathbf{e}_2'-\mathbf{e}_2'')+f(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'')+$ $+f^*(\mathbf{e}_2'',\mathbf{e}_2')+\int f^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2')f(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2'')\,d\mathbf{e}_2'''+$ $+\int g^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2')g(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2'')\,d\mathbf{e}_2'''\,d\mathbf{k}_3'''+$ $+\int h^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{k}_4''',\mathbf{e}_2')\times$ $\times h(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{k}_4''',\mathbf{e}_2'')d\mathbf{e}_2'''\,d\mathbf{k}_3'''\,d\mathbf{k}_4'''+\ldots$	$g(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'')+g^*(\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'',\mathbf{e}_2')+$ $+\int f^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2')g(\mathbf{e}_2'',\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3'')\,d\mathbf{e}_2'''+$ $+\int g^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3'',\mathbf{e}_2')f(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2'')\,d\mathbf{e}_2'''+$ $+\int g^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2')\times$ $\times F(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'')d\mathbf{e}_2'''\,d\mathbf{k}_3'''+\ldots$
$\mathbf{e}_2'\mathbf{k}_3'$	…	…

(54)

Так как эта матрица должна совпадать с единичной матрицей, то после вычитания единичной матрицы элементы разности должны быть равны нулю. Тем самым для каждой клетки матрицы (54) мы получаем некоторое соотношение между коэффициентами рассеяния и испускания. Например, для первой клетки в первой строке это соотношение имеет вид

$$f(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'')+f^*(\mathbf{e}_2'',\mathbf{e}_1')+\int f^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2')f(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2'')\,d\mathbf{e}_2''+ \\ +\int g^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2')g(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2'')\,d\mathbf{e}_2'''\,d\mathbf{k}_3'''+\ldots=0. \qquad (55)$$

В частности, если в соотношении (55) положить $\mathbf{e}_2'=\mathbf{e}_2''$, то оно приобретает простой физический смысл: вещественная часть функции f для рассеянной волны в направлении распространения падающей волны определяется взятой со знаком минус суммой абсолютных величин квадратов отдельных коэффициентов рассеяния (с испусканием или без испускания новых частиц), т.е. просто полной вероятностью хоть какого-нибудь процесса рассеяния или испускания. Физически этого и следовало ожидать, так как для когерентных рассеянных волн, уходящих строго вперед, служит мерой количество излучения, заимствованного у первичных волн[4]. При $\mathbf{e}_2'\neq\mathbf{e}_2''$ соотношение (55) не допускает столь простой интерпретации.

При рассмотрении рассеяния частиц со спином соотношение (55) уступает место более сложным соотношениям. Они получаются из (55), если в число аргументов помимо $\mathbf{e}_2'$ включить спиновые индексы и, кроме интегрирования по $d\mathbf{e}_2'''$ или, соответственно, по $d\mathbf{k}_3'''$ провести суммирование по спиновым индексам.

От переменных $\mathbf{e}_2'$ с помощью преобразования можно перейти к новым переменным, например, к квантовым числам момента импульса $l'm'$. В этом случае матричные элементы f зависят от новых переменных $f=f(l'm',l''m'')$ и, если частицы не имеют спина, то f отличны от нуля лишь при $l'=l''$, $m'=m''$, так как при столкновении частиц полный момент импульса сохраняется. Если испускания новых частиц не происходит (т.е. если $g=h=\ldots=0$), то, как уже говорилось, матричные элементы $f(l'm',l'm')$ должны иметь вид $e^{i\eta'}-1$,

[4] К. Вик использовал это обстоятельство в работе, которая должна вскоре выйти из печати, для вычисления полного сечения и предложил физическую интерпретацию упомянутого соотношения. Кроме того, Вик указал мне на работу Брейта (Phys. Rev., 1941), в которой содержатся аналогичные соображения о «матрице рассеяния». К сожалению, мне до сих пор не удалось ознакомится с работой Брейта. Вик сообщил мне также о существовании неопубликованных результатов Бора, Плачека и Пайерлса об аналогичных соотношениях между коэффициентами рассеяний. Пользуясь случаем, я хотел бы выразить Вику свою признательность за обсуждение вопросов, затронутых в данной работе.

и соотношение (55) переходит в тривиальное соотношение

$$\left(e^{i\eta'}-1\right)+\left(e^{-i\eta'}-1\right)+\left(e^{i\eta'}-1\right)\left(e^{-i\eta'}-1\right)=0.$$

В отсутствии излучения f имеет более общий вид $f(l'm',l'm')=\alpha e^{i\eta'}-1$, и соотношение (55) переходит в соотношение

$$\alpha^2-1+\sum_{l'''m'''}\int d\mathbf{k}_3'''|g(l'''m'''\mathbf{k}_3''',l'm')|^2+\ldots=0. \tag{56}$$

Это соотношение эквивалентно утверждению, что сумма вероятностей для чистого рассеяния и рассеяния, сопровождающегося испусканием новых частиц, равна единице.

Для второй клетки в первой строке матрицы (54) по аналогии с соотношением (55) получаем соотношение

$$g(\mathbf{e}_2',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'')+g^*(\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'',\mathbf{e}_2')+\int f^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2')g(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'')\,d\mathbf{e}_2'''+$$
$$+\int g^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3'',\mathbf{e}_2')f(\mathbf{e}_2''',\mathbf{e}_2'')\,d\mathbf{e}_2'''+\int g^*(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2')F(\mathbf{e}_2''',\mathbf{k}_3''',\mathbf{e}_2'',\mathbf{k}_3'')\,d\mathbf{e}_2'''\,d\mathbf{k}_3'''+\ldots=0. \tag{57}$$

Аналогичные соотношения следуют и для всех остальных клеток матрицы (54). Все эти соотношения обладают тем общим свойством, что сумма выражений первой и второй степени относительно элементов матрицы S в них равна нулю. До сих пор эти соотношения не принимались во внимание потому, что задачи о столкновении частиц почти всегда решались методом теории возмущений, а сравнение линейных и квадратичных выражений делает необходимым вычисление возмущений до членов второго порядка.

Впрочем, соотношения (55), (57) и т.д. допускают еще одно матричное представление, позволяющее выявить их характер более отчетливо, чем соотношение $\widetilde{S}^*S=1$. Чтобы получить это представление, воспользуемся соотношением (12):

$$S=1+R.$$

Во всех задачах о столкновении частиц матрица R является определяющей для собственно рассеянных волн, но, как следует из раздела IIб, содержит сингулярную часть. Так как

$$\widetilde{S}^*S=\left(1+\widetilde{R}^*\right)(1+R)=1,$$

то

$$\widetilde{R}^*R=-R-\widetilde{R}^*. \tag{58}$$

Отсюда отчетливо виден истинный характер соотношений (55), (57), а именно: возникновение связей между линейными и квадратичными членами в коэффициентах рассеяния.

От применения содержащихся в (58) соотношений к отдельным конкретным задачам мы воздержимся, так как в настоящей работе речь идет лишь о принципиальной формулировке таких соотношений.

Воспользуемся для представления наблюдаемых величин матрицей η с помощью соотношения (53)

$$S=e^{i\eta}.$$

Соотношения (58) при этом будут выполняться автоматически, если только η — эрмитова матрица. Справедливости ради следует заметить, что взаимосвязь между

элементами матрицы η и коэффициентами весьма сложны. Кроме того, необходимо еще предварительно установить физические условия, определяющие матрицу η. Все это означает, что соотношение (53), по крайней мере в настоящее время, не имеет практического значения для нахождения матрицы S.

в) Соотношения между наблюдаемыми величинами, не следующие из общих свойств матрицы S

Разумеется, условия $\widetilde{S}^{*}S = 1$ или эквивалентного ему соотношения (58) вместе с требованиями лоренц-инвариантности недостаточно для нахождения коэффициентов рассеяния в любой физической задаче. Поэтому в современной теории для соблюдения ограничений, устанавливаемых соотношением (19) или (58), исходят из соображений, связанных с принципом соответствия, или учитывают при построении простой функции Гамильтона лоренц-инвариантность с тем, чтобы, используя затем соотношения (22) и (25), найти унитарную матрицу S.

В будущей теории элементарных частиц ограничения, устанавливаемые соотношением (19) или (58), скорее всего будут соблюдаться иным способом.

В этом нас убеждают следующие соображения. Во-первых, все изученные до сих пор функции Гамильтона, учитывающие взаимодействие элементарных частиц, приводят к известным трудностям, связанным с появлением расходимостей. Во-вторых, нет никаких оснований считать, что функция Гамильтона, если она вообще существует, имеет столь простой вид, как изученные ранее функции Гамильтона. Современная теория указывает, например, на существование между элементарными частицами так называемых многочастичных сил, проявляющихся косвенно — через другие «виртуальные» частицы. Нет никаких оснований считать, что такие силы не могут быть с самого начала включены в функцию Гамильтона. Можно представить себе, например, что добавление различных (быть может, бесконечно многих) членов, описывающих многочастичные силы, позволит построить функцию Гамильтона, не приводящую к каким-либо трудностям с возникновением расходимостей. Возможно, что такая функция Гамильтона удовлетворяла бы всем требованиям, вытекающим из принципа соответствия, и обладала бы нужными релятивистскими свойствами. Но такая функция Гамильтона не может служить отправным пунктом теории, а должна быть выведена косвенно из каких-то простых условий иного рода, например, из требования, чтобы расходимости в теории не возникали.

Таким образом, в любом случае следует ожидать, что исходным пунктом будущей теории послужат условия иного рода, удовлетворяющие соотношениям (19) или (58), а не функция Гамильтона, причем может остаться открытым вопрос о том, позволят ли эти условия построить какую-нибудь сложную функцию Гамильтона или, что более правдоподобно, минуя функцию Гамильтона, приведут к построению непосредственно матрицы S или матрицы η.

Существование функции Гамильтона маловероятно по следующим причинам. Функцию Гамильтона можно построить обычным способом — интегрированием по пространству одной из плотностей энергии, зависящих от волновых функций. В этом случае взаимодействие нельзя вводить иначе, чем через близкодействующие силы, т. е. образуя произведение нескольких волновых функций, взятых в одной и той же точке. При таком подходе возникновение расходимостей представляется неизбежным. Но можно поступить иначе и учесть, что в функцию Гамильтона каким-то образом включены представления о дальнодействии, о чем свидетельствует, например, предположение о конечных радиусах частиц. При таком подходе вряд ли удастся избежать введения аналогичного «дальнодействия» во временном направлении без нарушения лоренц-инвариантности. Но, как показывает обычное

уравнение

$$H\psi = i\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{59}$$

понятие «функция Гамильтона» связано с представлением не о «дальнодействии», а о «близкодействии» во временном направлении. Под «близкодействием» и «дальнодействием» здесь имеется в виду чисто формальное возникновение дифференциальных или, соответственно, интегральных соотношений. По этим причинам мы считаем маловероятным появление функции Гамильтона в будущей теории.

Ответ на вопрос о том, какие новые соотношения восполнят пробел, который возникает из-за отказа от функции Гамильтона, естественно требует выяснения взаимосвязи матрицы η с существующими ныне основами теории и, в частности, с функцией Гамильтона. Для этого лучше всего представить функцию Гамильтона H в виде объемного интеграла от плотности энергии h, которую в свою очередь необходимо разложить в сумму плотности кинетической энергии h_0 и плотности энергии взаимодействия h_1:

$$H = \int dV(h_0 + h_1). \tag{60}$$

Плотность h_1 в общем случае релятивистски инвариантна (например, как скалярное произведение вектора плотности тока и вектора-потенциала). Матричное представление функции Гамильтона H в пространстве импульсов $\mathbf{k}', \mathbf{k}''$ имеет вид

$$\left(\mathbf{k}'\middle|\int dV h_0\middle|\mathbf{k}''\right) = \delta(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\sum k_i^{0'}; \tag{61}$$

$$\left(\mathbf{k}'\middle|\int dV h_1\middle|\mathbf{k}''\right) = f(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\int dV \exp\left\{i\left(\sum \mathbf{k}_i'' - \sum \mathbf{k}_i'\right)\mathbf{r}\right\} = $$
$$= f(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')(2\pi)^3\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right). \tag{62}$$

Для зависящего от времени уравнения Шредингера в импульсном пространстве $\chi(\mathbf{k}_i', t)$ удовлетворяет волновому уравнению

$$\chi(\mathbf{k}', t+dt) = \int\left\{\delta(\mathbf{k}',\mathbf{k}'') - i\,dt\left[\sum k_i^{0'}\delta(\mathbf{k}',\mathbf{k}'') + \right.\right.$$
$$\left.\left. + (2\pi)^3 f(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right)\right]\right\} d\mathbf{k}''\chi(\mathbf{k}'', t). \tag{63}$$

Полагая

$$\chi(\mathbf{k}', t) = e^{-i\sum k_i^{0'} t}\psi(\mathbf{k}'t), \tag{64}$$

получаем для ψ уравнение

$$\psi(\mathbf{k}', t+dt) = \int\left[\delta(\mathbf{k}',\mathbf{k}'') - (2\pi)^3 i\,dt f(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\times\right.$$
$$\left.\times \exp\left\{i\left(\sum k_i^{0'} - \sum k_i^{0''}\right)t\right\}\delta\left(\sum \mathbf{k}_i' - \sum \mathbf{k}_i''\right)\right] dk''\psi(\mathbf{k}'', t). \tag{65}$$

В предположении, что энергия взаимодействия h_1 и, следовательно, функция f очень малы, уравнение (65) удается проинтегрировать и получить в первом

приближении

$$\psi(\mathbf{k}',t)=\int\Big[\delta(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')-(2\pi)^3 i f(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')\int\limits_0^t dt\,\exp\Big\{i\Big(\sum k_i^{0\prime}-\sum k_i^{0\prime\prime}\Big)t\Big\}\times$$
$$\times\,\delta\Big(\sum \mathbf{k}_i'-\sum \mathbf{k}_i''\Big)\Big]\,dk''\psi(\mathbf{k}'',0). \qquad (66)$$

Следовательно, в том же первом приближении из начального состояния, заданного соотношением (10), получаем

$$\psi(\mathbf{k}'',\infty)=\delta(\mathbf{k}'',\mathbf{k}')-(2\pi)^4 i\delta_+\Big(\sum k_i^{0\prime}-\sum k_i^{0\prime\prime}\Big)\delta\Big(\sum \mathbf{k}_i'-\sum \mathbf{k}_i''\Big)f(\mathbf{k}',\mathbf{k}''). \qquad (67)$$

С другой стороны, из (25) и (53) (в первом приближении, если предположить, что матрица η мала) получаем для сингулярной части функции ψ следующее выражение:

$$\delta(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')+i\delta\Big(\sum \mathbf{k}_i'-\sum \mathbf{k}_i''\Big)\delta_+\Big(\sum k_i^{0\prime}-\sum k_i^{0\prime\prime}\Big)(\mathbf{k}'|\eta|\mathbf{k}''). \qquad (68)$$

Сравнивая с (67), заключаем, что

$$(\mathbf{k}'|\eta|\mathbf{k}'')=-(2\pi)^4 f(\mathbf{k}',\mathbf{k}'')+\text{члены высшего порядка.}$$

Как показывают соотношения (62) и (68), матрица η в первом приближении совпадает (с точностью до несущественных множителей и перестановки) с подматрицей из энергий взаимодействия, соответствующей переходам между состояниями с равной энергией и одинаковыми импульсами. Следует заметить, что это первое приближение не является сколько-нибудь хорошей аппроксимацией к точному решению. Тем не менее соотношение (68) указывает на существование определенной взаимосвязи между матрицей η и энергией взаимодействия.

Эта взаимосвязь наводит на мысль характеризовать физическую задачу заданием не функции Гамильтона, а матрицы η, и пытаться искать простые соотношения, связывающие матрицу η с ее физическим содержанием. Однако и в этом случае нет никаких оснований ожидать, что матрица η имеет какой-то особенно простой вид, например, содержит только парные взаимодействия между частицами. Во всех известных случаях, в которых функция Гамильтона имела простой вид и коэффициенты рассеяния (и, следовательно, матрицу η) удалось вычислить в первом приближении (в принципе расходящихся) ряда возмущений, матрица η также не имела простого вида.

В частности, необходимо иметь в виду, что существование стационарных состояний системы нескольких элементарных частиц отражено в структуре матрицы η весьма сложным образом, а именно: из существования таких состояний следует, что матрица S содержит строки и столбцы, относящиеся к переходным состояниям составной системы, причем энергия покоя соответствующих стационарных состояний играет такую же роль, как масса покоя элементарных частиц в остальных строках и столбцах. Действительно, в этом случае может существовать процесс столкновения, в результате которого составные частицы такого рода возникают и покидают место столкновения с какой-то скоростью. В представление же матрицы η составные и элементарные частицы входят равноправно. Это обстоятельство, с одной стороны, следует считать удовлетворительным, если ожидать, что в будущей теории массы покоя будут однозначно определены — так же, как энергии стационарных

состояний в существующей теории. С другой стороны, это обстоятельство отчетливо показывает, что матрица η и в будущей теории не может иметь простого вида, и что матрицу η прийдется задавать из каких-то простых условий иного рода.

Нахождение этих простых условий я считаю центральной, до сих пор не решенной проблемой теории элементарных частиц. Цель настоящей работы заключалась в том, чтобы показать важную роль, которую смогут играть в будущей теории матрица η или соответствующая унитарная матрица S, если в этой теории не найдется места функции Гамильтона и функции Шредингера, удовлетворяющей уравнению (59).

НАБЛЮДАЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ В ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ. II*

В продолжение предыдущей работы исследованы физические следствия из теории, в которой задана не функция Гамильтона, а введенная в части I η-матрица. В этой теории, в отличие от традиционной квантовой теории волновых полей, не возникает никаких трудностей, связанных с появлением расходимостей, и поставленные проблемы допускают строгое решение. Вычисления проведены для двух различных законов взаимодействия. В одном случае — при δ-образном взаимодействии — получаются результаты, которые во многом согласуются с результатами современной теории. В другом случае взаимодействие, не допускающее явной интерпретации в духе принципа соответствия, приводит к сечениям, которые при больших энергиях сталкивающихся частиц стремятся к конечному пределу. Исследовано рождение новых частиц при законе взаимодействия, в который включено парное рождение. При малых энергиях участвующих в столкновении частиц, полученные нами результаты аналогичны результатам существующей теории, при больших энергиях и определенных условиях возникают взрывообразные процессы множественного рождения. Эти процессы подробно рассмотрены с математической точки зрения. Поскольку трудностей, связанных с появлением расходимостей не возникает, полученные нами результаты точно удовлетворяют требованиям релятивистской теории.

Предпринятая в предыдущей работе попытка выделить в квантовой теории волновых полей величины, которые как «наблюдаемые» войдут в будущую теорию элементарных частиц, привела к следующему результату: совокупность всех «наблюдаемых» (в смысле нашей работы) в процессах рассеяния, испускания и поглощения может быть описано одной унитарной матрицей S. Абсолютная величина квадрата элемента матрицы S, соответствующего переходу из состояния A в состояние B, дает вероятность того, что состояние B представлено в уходящей волне, если состояние A реализовано в падающей волне. Унитарная матрица S связана с эрмитовой матрицей η соотношением

$$S = e^{i\eta}. \qquad (1)$$

Собственные значения матрицы η — разности фаз между падающими и исходящими волнами. Матрица η релятивистски инвариантна. Следствия из этого утверждения для отдельных элементов матрицы η были изложены в части I. Если энергию взаимодействия между элементарными частицами допустимо рассматривать как малое возмущение, то матрица η по существу совпадает с подматрицей матрицы энергии взаимодействия, соответствующей переходам между состояниями с равной полной энергией и равными полными импульсами. При достаточно простой функции Гамильтона энергию взаимодействия нельзя считать малой, и мы приходим к матрице η, которая в общем случае имеет труднообозримый вид, и кроме того, как

---

* Die beobachtbaren Grössen in der Theorie der Elementarteilchen. II. — Zs. Phys., 1943, **120**, 673–702. *Перевод Ю. А. Данилова.*

правило, возникают известные трудности с расходимостями. К этому необходимо добавить, что существование функции Гамильтона сколько-нибудь простого вида вряд ли можно обосновать физическими соображениями.

Настоящая работа ставит перед собой обратную задачу исследовать те физические следствия, к которым приводит существование матрицы η простого вида. Измененная постановка задачи имеет некоторые важные преимущества по сравнению с обычным предположением о существовании функции Гамильтона простого вида. Во-первых, удается полностью избежать трудностей, связанных с возникновением расходимостей. Последнее обстоятельство обусловлено, во-первых, тем, что элементы матрицы η описывают только переходы между состояниями с равной энергией, в то время как расходимости обычно возникают при суммировании по виртуальным промежуточным состояниям с произвольной энергией. Во-вторых, выбрав матрицу η с указанными свойствами, мы автоматически удовлетворяем требованиям релятивистской теории и квантовой теории, в то время как в современной теории при возникновении различного рода трудностей нередко приходится вводить «правила обрезания». Наконец, в теории с заданной матрицей η из-за сходимости метода допускают решение даже самые сложные проблемы, ранее ускользавшие от всех попыток более точного рассмотрения, например, задача о взрывообразном множественном рождении частиц.

Против предлагаемого метода в целом можно возразить, указав на то, что матрица η, как правило, не задана, в то время как не слишком сложную функцию Гамильтона можно было бы обосновать, исходя из принципа соответствия. Подобное возражение можно отвергнуть, сославшись на то, что соображения, основанные на принципе соответствия, как правило, основаны на предположении о допустимости рассмотрения энергии взаимодействия как малого возмущения, но в этом смысле принцип соответствия позволяет однозначно определять не только энергию взаимодействия, но и матрицу, совпадающую с подматрицей из энергии взаимодействия. Таким образом, соображения, исходящие из принципа соответствия, позволяют с равным основанием обосновывать и простую функцию Гамильтона, и простую матрицу η (или, как мы предпочитаем называть, матрицу взаимодействия). К сожалению, в будущую теорию не может входить функция Гамильтона, и матрицу взаимодействия придется определять из соображений другого рода, поэтому ниоткуда не следует, что она должна иметь простой вид. Тем не менее, исследуя простые матрицы η, мы можем получить общее представление о возможностях будущей теории и характера зависимости в ней.

В настоящей работе мы рассмотрим три различных приложения соображениям, изложенным в части I.

Сначала мы исследуем обычное δ-образное взаимодействие между элементарными частицами, приводящее только к рассеянию, но не к рождению новых частиц. Полученные нами результаты будут лишь несущественно отличаться от результатов современной теории (примененной к задачам чистого рассеяния). Затем мы заменим δ-образное взаимодействие другим взаимодействием, которое невозможно задать с помощью силы, зависящей от расстояния между элементарными частицами, и сколько-нибудь просто выразить через функцию Гамильтона. Это взаимодействие удовлетворяет требованиям теории относительности и поэтому служит примером взаимодействий между элементарными частицами, принципиально отличных от тех, к которым приводят традиционные соображения, основанные на принципе соответствия. В заключение мы рассмотрим взаимодействие, при котором возможно рождение новых частиц, и исследуем условия возникновения взрывообразных процессов множественного рождения частиц.

Во избежание излишних усложнений мы будем проводить все вычисления для элементарных частиц без спина и заряда, удовлетворяющих статистике Бозе.

В современной теории для этого было бы необходимо рассматривать скалярную волновую функцию φ и функцию Лагранжа вида

$$L=\frac{1}{2}\left(\dot{\varphi}^2-\operatorname{grad}^2\varphi-\varkappa^2\varphi^2\right) \tag{2}$$

(h и c выбраны в качестве единиц, как в части I, $\varkappa$ — масса покоя элементарных частиц в см$^{-1}$). По обычной схеме мы получаем

$$\pi=\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}}=\dot{\varphi},\quad H=\frac{1}{2}\left(\pi^2+\operatorname{grad}^2\varphi+\varkappa^2\varphi^2\right). \tag{3}$$

Если ограничить волновой процесс нормировочным объемом V и перейти в импульсное пространство $\left(k^{0^2}=k^2+\varkappa^2\right)$, то окажется, что

$$\begin{aligned}\varphi&=\sum_{\mathbf{k}}\left(2k^0V\right)^{-1/2}\left(a_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr}-k^0t)}+a^*_{-\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr}+k^0t)}\right),\\ \pi&=\sum_{\mathbf{k}}\left(2k^0V\right)^{-1/2}ik^0\left(-a_{\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr}-k^0t)}+a^*_{-\mathbf{k}}e^{i(\mathbf{kr}+k^0t)}\right).\end{aligned} \tag{4}$$

Для амплитуд a_k получается представление

$$a^*_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}}=N_{\mathbf{k}},\quad a_{\mathbf{k}}N_{\mathbf{k}}=(N_{\mathbf{k}}+1)a_{\mathbf{k}},\quad a^*_{\mathbf{k}}N_{\mathbf{k}}=(N_{\mathbf{k}}-1)a^*_{\mathbf{k}}. \tag{5}$$

Если перейти к пределу бесконечного нормировочного объема, то сумма по $\mathbf{k}$ перейдет в интеграл

$$\sum_{\mathbf{k}}\to\frac{V}{(2\pi)^3}\int d\mathbf{k}. \tag{6}$$

Таким образом, при переходе от дискретной к непрерывной нормировке матричный элемент, соответствующий переходу от полного числа частиц N' к полному числу частиц N'' необходимо умножить на $\left[V/(2\pi)^3\right]^{(N'+N'')/2}$.

Амплитуды $a_{\mathbf{k}}$ мы будем в дальнейшем всегда рассматривать как операторы, не зависящие от переменной t, при интегрировании по t амплитуды будут считаться постоянными. Переменная t в наших расчетах будет играть роль, скорее, формального параметра, чем времени.

I

а) Рассеяние частиц при δ-образном взаимодействии

В простейшем случае взаимодействие, приводящее к рассеянию элементарных частиц, можно представить в виде

$$\eta=\varepsilon\int d\mathbf{r}\,dt\,\varphi^4. \tag{7}$$

Взаимодействие такого рода соответствует обычному взаимодействию типа δ-функции от расстояния между любыми двумя частицами. Если φ входит в выражение для η в степени меньше четырех, то никакого взаимодействия между частицами не возникает, так как процессы, в которых в начальном или в конечном состоянии

имеется только одна частица, были бы не совместимы с законами сохранения энергии и импульса. Более того, из соотношений (4) следует, например, что

$$\int d\mathbf{r}\, dt \varphi^3 = 0. \tag{8}$$

Постоянная ε в уравнении (7) — безразмерное вещественное число, так как φ имеет размерность обратной длины. Взаимодействие (7) можно считать связанным с электромагнитным взаимодействием, так как его величина определяется безразмерным числом $e/\sqrt{\hbar c}$, т. е. постоянной тонкой структуры Зоммерфельда.

Если соотношение (7) выразить в импульсном пространстве через операторы a_k, то последовательность a_k и a_k^* можно было бы однозначно определить из вычислений. Члены, в которых не все величины со звездочками стоят слева от величин без звездочек, могут приводить к расходимостям. Поэтому мы несколько видоизменим выражение (7) (в духе теории Иордана и Клейна[1]), оговорив заранее, что во всех членах a_k^* должны стоять слева от a_k. Введенное нами изменение сказывается либо на интерпретации взаимодействия (7) на основе принципа соответствия, либо на релятивистской инвариантности. Если перейти к пределу бесконечного нормировочного объема, то для элементов матрицы η мы получим следующее выражение:

$$(\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2'|\eta|\mathbf{k}_1''\mathbf{k}_2'') = \frac{3\varepsilon}{2}\frac{(2\pi)^{-2}}{\sqrt{k_1^{0\prime}k_2^{0\prime}k_1^{0\prime\prime}k_2^{0\prime\prime}}}\delta(\mathbf{k}_1' + \mathbf{k}_2' - \mathbf{k}_1'' - \mathbf{k}_2'')\delta\left(k_1^{0\prime} + k_2^{0\prime} - k_1^{0\prime\prime} - k_2^{0\prime\prime}\right). \tag{9}$$

Этот матричный элемент обладает релятивистскими свойствами, требуемыми в части I (раздел IIг).

Чтобы определить собственные значения матрицы η, удобно ввести новые переменные по формулам

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad K^0 = k_1^0 + k_2^0, \quad \zeta = \frac{k_{2z}}{k_2}, \quad \alpha = \operatorname{arctg}\frac{k_{2y}}{k_{2x}}. \tag{10}$$

Элементарный объем в этих координатах нетрудно найти, вычислив якобиан $(\mathbf{v} = k/k^0)$:

$$d\mathbf{K}\, dK^0\, d\zeta\, d\alpha \to d\mathbf{k}_1\, d\mathbf{k}_2 \frac{(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2, \mathbf{k}_2)}{k_2^3}. \tag{11}$$

Отсюда, отбрасывая единичную матрицу, получаем

$$(\zeta'\alpha'|\eta|\zeta''\alpha'') = \frac{3\varepsilon}{2}\frac{(2\pi)^{-2}}{\sqrt{k_1^{0\prime}k_2^{0\prime}k_1^{0\prime\prime}k_2^{0\prime\prime}}}\sqrt{\frac{k_2'^3 k_2''^3}{(\mathbf{v}_1' - \mathbf{v}_2', \mathbf{k}_2')(\mathbf{v}_1'' - \mathbf{v}_2'', \mathbf{k}_2'')}}. \tag{12}$$

В частности, если положить $\mathbf{K}' = \mathbf{K}'' = 0$, т. е. перейти в систему центра масс, то соотношение (12) упрощается и принимает вид

$$(\zeta'\alpha'|\eta|\zeta''\alpha'') = \frac{3\varepsilon v'}{16\pi^2} = \frac{3\varepsilon v''}{16\pi^2} = \frac{3\varepsilon v}{16\pi^2}. \tag{13}$$

(В дальнейшем мы будем отбрасывать штрихи у величин, принимающих одни и те же значения в начальном и конечном состоянии.)

[1] *Jordan P., Klein O.* Zs. Phis., 1927, **45**, 751.

Собственные функции, в которых матрица η приводится к диагональному виду являются, как это всегда бывает в задачах чистого рассеяния (см. часть I, раздел IIIa), сферическими функциями. Действительно, соотношению

$$\int d\zeta'\, d\alpha' P_n^m(\zeta') e^{im\alpha'} (\zeta'\alpha'|\eta|\zeta''\alpha'') = \eta_{n,m} P_n^m(\zeta'') e^{im\alpha''} \tag{14}$$

удовлетворяют

$$\eta_{0,0} = \frac{3\varepsilon v}{4\pi}, \quad \eta_{n,m} = 0 \tag{15}$$

(n, m — любые целые числа, не равные нулю одновременно).

Это означает, что в системе центра масс рассеяние сферически симметрично. Фаза δ_n волны, соответствующей n-й сферической функции, составляет половину собственного значения $\eta_{n,0}$, если эту волну представить в виде $\sin(kr + \delta)/r$, как в обычной теории. В нашем случае из известной формулы для сечения

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sum_n (2n+1) \sin^2 \delta_n \tag{16}$$

с учетом соотношений (15) находим:

$$Q = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \frac{3\varepsilon v}{8\pi}, \tag{17}$$

поэтому в пределе при $v \ll 1$ или $1 - v \ll 1$

$$Q = \begin{cases} \dfrac{9\varepsilon^2}{16\pi\varkappa^2} & \text{при } v \ll 1, \\ \dfrac{4\pi}{k^2} \sin^2 \dfrac{3\varepsilon}{8\pi} & \text{при } 1 - v \ll 1. \end{cases} \tag{18}$$

Следовательно, с увеличением импульса сечение убывает, как $1/k^2$, и никогда не возрастает быстрее, чем квадрат длины волны. При определенных численных значениях ε, например, при $\varepsilon = 8\pi^2/3$, сечение убывает еще быстрее. В этом смысле одни значения ε можно считать выделенными по сравнению с другими, хотя все значения ε допустимы без каких бы то ни было дополнительных условий и приводят к вполне осмысленным утверждениям о рассеянии.

Соотношения (17) и (18) во многом совпадают с результатами обычной теории и отличаются от последних, главным образом, тем, что остаются точными при любых значениях ε и k.

б) Рассеяние частиц при взаимодействии более общего вида

Соотношение (17) наводит на мысль, что сечение рассеяния в релятивистском пределе в принципе не может быть больше, чем квадрат длины волны. В том, что подобное предположение неправильно, нетрудно убедиться, если вместо соотношения (9) для матрицы η мы выберем более общее соотношение

$$(\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2'|\eta|\mathbf{k}_1''\mathbf{k}_2'') = \frac{3\varepsilon}{2} \frac{(2\pi)^{-2}}{\sqrt{k_1^{0\prime} k_2^{0\prime} k_1^{0\prime\prime} k_2^{0\prime\prime}}} \frac{\varkappa^2 \left(k_1^{0\prime} k_2^{0\prime} - \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' + k_1^{0\prime\prime} k_2^{0\prime\prime} - \mathbf{k}_1''\mathbf{k}_2''\right)}{\left(k_1^{0\prime} k_1^{0\prime\prime} - \mathbf{k}_1'\mathbf{k}_1''\right)\left(k_1^{0\prime} k_2^{0\prime\prime} - \mathbf{k}_2'\mathbf{k}_2''\right)}. \tag{19}$$

Это соотношение также удовлетворяет требованиям теории относительности (см. часть I, раздел IIг), хотя оно вряд ли позволяет задать силу как функцию расстояния

между двумя частицами. Во всяком случае речь, могла бы идти о весьма сложной зависимости при конечных расстояниях с запаздыванием по определенному закону, обеспечивающим выполнение требований теории относительности. В системе центра масс (19) принимает вид

$$(\zeta'\alpha'|\eta|\zeta''\alpha'') = \frac{3\varepsilon v}{4\pi^2}\frac{\varkappa^2}{k^2}\frac{1+\frac{\varkappa^2}{2k^2}}{\left[1+\frac{\varkappa^2}{k^2}-\cos(k_1'k_1'')\right]^2} = \frac{3\varepsilon v}{4\pi^2}\frac{\gamma\left(1+\frac{\gamma}{2}\right)}{(1+\gamma-z)^2}, \tag{20}$$

где $\gamma = \varkappa^2/k^2$, $z = \cos(k_1', k_2'') = \zeta'\zeta'' + \sqrt{1-\zeta'^2}\sqrt{1-\zeta''^2}\cos(\alpha'-\alpha'')$, и отброшены штрихи у k и v, так как эти величины в начальном и конечном состоянии принимают равные значения.

Для дальнейших вычислений удобно ввести разложение по сферическим функциям

$$\frac{1}{(1+\gamma-z)^2} = \sum b_n P_n(z), \quad b_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\int_{-1}^{+1} dz \frac{P_n(z)}{(1+\gamma-z)^2}, \tag{21}$$

Коэффициенты b_n можно определить, используя коэффициенты разложения производящей функции

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xz+x^2}} = \sum x^n P_n(z). \tag{22}$$

Вычислив вспомогательный интеграл

$$I = \int_{-1}^{+1} \frac{dz}{(1+\gamma-z)^2\sqrt{1-2xz+x^2}} = \frac{x}{a^3}\left[\ln\frac{1-x+\gamma-a}{1-x+\gamma+a} + \frac{2a}{x\beta}(1-x-\gamma a)\right], \tag{23}$$

где $\beta = 2\gamma+\gamma^2$ и $a = \sqrt{(1-x)^2-2\gamma x}$, получим

$$b_n = \frac{n+\frac{1}{2}}{2\pi i}\oint \frac{dx}{x^{n+1}} I. \tag{24}$$

При $\gamma \gg 1$ из соотношения (21) непосредственно следует

$$b_0 \approx \frac{1}{\gamma^2}, \quad b_n = 0 \quad \text{при} \quad n > 0. \tag{25}$$

При $\gamma \ll 1$ необходимо различать два случая: $n \ll 1/\sqrt{\gamma}$ и $n \gg 1/\sqrt{\gamma}$. Действительно, при $\gamma \ll 1$ из (25) получаем оценку

$$I \approx \frac{1}{\gamma(1-x)} + \frac{x}{(1-x)^3}\ln\gamma + \ldots, \tag{26}$$

откуда при малых n следует, что

$$b_n \approx \left(n+\frac{1}{2}\right)\left[\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{2}n(n+1)\ln\gamma + \ldots\right]. \tag{27}$$

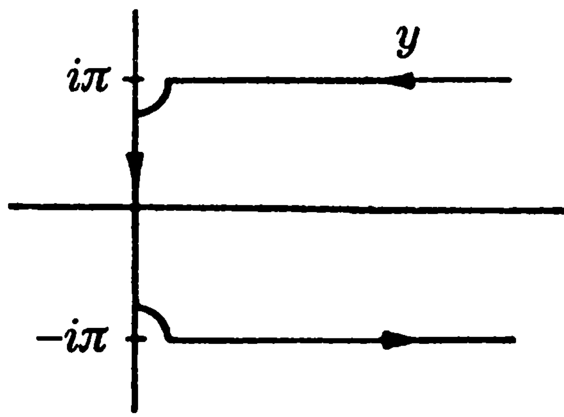


Рис. 1

При больших n разложение (26) становится непригодным и поступить можно, например, следующим образом: заменить в (24) переменную x новой переменной y, заданной соотношениями

$$\begin{aligned} 1 - x + \gamma + a &= \sqrt{\beta} e^{y}, \\ 1 - x + \gamma - a &= \sqrt{\beta} e^{-y} \end{aligned} \tag{28}$$

и взять интеграл по контуру, изображенному на рис. 1, на комплексной y-плоскости. Особой точке $x = 0$ соответствует точка $y = \frac{1}{2} \ln \frac{2+\gamma}{\gamma}$.

Основной вклад в интеграл при больших n дают непосредственные окрестности точек и $y = \pm i\pi$. Производя разложение в окрестности каждой из этих точек, получаем

$$b_n = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\sqrt{2\pi n}}{\left(1 + \gamma + \sqrt{\beta}\right)^{n+1/2} \beta^{3/4}} \quad \text{при} \quad n \gg 1/\sqrt{\gamma} \quad \text{и} \quad \gamma \ll 1. \tag{29}$$

Таким образом, с увеличением n коэффициенты разложения b_n сначала возрастают, а при достаточно больших n ($n \gg 1/\sqrt{\gamma}$) экспоненциально убывают.

Для вычисления собственных значений матрицы η можно воспользоваться известным соотношением

$$P_n(z) = P_n(\zeta')P_n(\zeta'') + \sum_r \frac{(n-r)!}{(n+r)!} P_n^r(\zeta')P_n^r(\zeta'') \left(e^{ir(\alpha'-\alpha'')} + e^{-ir(\alpha'-\alpha'')}\right). \tag{30}$$

Из него получаем:

$$\int P_n^m(\zeta) e^{im\alpha'} d\zeta' \, d\alpha' \sum b_l P_l(z) = 2\pi \frac{b_n}{n + \frac{1}{2}} P_n^m(\zeta'') e^{im\alpha''}. \tag{31}$$

Наконец, сравнение формул (13), (21), (25), (27), (29) и (31) показывает, что

$$\eta_{n,m} = \frac{3\varepsilon v}{2\pi} \begin{cases} 1 + \frac{\gamma}{2} + \frac{n(n+1)}{2} \gamma \ln \gamma + \ldots & \text{при } \gamma \ll 1,\, n \ll \frac{1}{\sqrt{\gamma}}; \\ \frac{\sqrt{2\pi n} \beta^{1/4}}{2(1 + \gamma + \sqrt{\beta})^{n+1/2}} & \text{при } \gamma \ll 1,\, n \gg \frac{1}{\sqrt{\gamma}}; \\ 1 & \text{при } \gamma \gg 1,\, n = 0; \\ 0 & \text{при } \gamma \gg 1,\, n \neq 0. \end{cases} \tag{32}$$

Таким образом, собственные значения матрицы η, т. е. разности фаз между падающей и уходящей волной, имеют в релятивистском пределе $k^2 \gg \varkappa^2$, $\gamma \ll 1$ при всех n до предела $n \sim 1/\sqrt{\gamma}$, т. е. для всех низших сферических функций, одно и то же значение, и лишь при значениях, превышающих $n \sim 1/\sqrt{\gamma}$, разности фаз убывают. Вследствие этого полное сечение рассеяния значительно больше $4\pi/k^2$ и при $k \to \infty$ стремится к конечному пределу. Рассеяние перестает быть сферически симметричным, малые отклонения встречаются значительно чаще больших. Полное сечение можно вычислить приближенно по формуле (16), просуммировав при постоянной фазе по всем n вплоть до значений порядка $1/\sqrt{\gamma}$. Из-за неточного

задания верхнего предела результат вычислений содержит неопределенный множитель порядка 1, который, однако, можно уточнить, перейдя к пределу $\varepsilon \ll 1$. В этом пределе удается точно вычислить сумму (16) и, интегрируя по z, найти полное сечение непосредственно из матрицы η. Окончательно получаем:

$$Q = \begin{cases} \dfrac{9\varepsilon^2}{4\pi\varkappa^2} & \text{при } k^2 \ll \varkappa^2, \\ \sim \dfrac{8\pi}{3\varkappa^2}\sin^2\dfrac{3\varepsilon}{4\pi} & \text{при } k^2 \gg \varkappa^2. \end{cases} \tag{33}$$

При взаимодействии типа (19) рассеяние сферически симметрично только при малых скоростях, а при больших скоростях направлено главным образом вперед. При ε порядка 1 полное сечение всегда имеет величину порядка $1/\sqrt{\varkappa^2}$, поэтому $1/\sqrt{\varkappa}$ можно считать своего рода величиной радиуса частицы.

Из рассмотренного нами примера взаимодействия (19) ясно, что теория с заданной матрицей η позволяет релятивистски непротиворечивым образом вводить понятие радиуса частицы. Это особенно важно, если учесть, что в космических лучах сечение рождения частиц в пределе больших энергий стремится к постоянному значению.

II
РОЖДЕНИЕ НОВЫХ ЧАСТИЦ

Простейшая матрица η, приводящая к рождению новых частиц, имеет вид

$$\eta = \lambda \int d\mathbf{r}\, dt\, \varphi^5. \tag{34}$$

Взаимодействие этого типа лежит в основе процессов, в которых при столкновении двух частиц сначала рождается *одна* новая частица. В более высоких приближениях при столкновении двух частиц может рождаться столько новых частиц, сколько допускают законы сохранения. Следует заметить, что вычисление любой физической величины для матрицы η, имеющей вид (34), сопряжено с большими трудностями. Гораздо проще производить вычисления, если

$$\eta = \lambda^2 \int d\mathbf{r}\, dt\, \varphi^6. \tag{35}$$

Именно этой матрицей η мы и будем пользоваться в дальнейшем. Взаимодействие (35) содержит в качестве первичного процесса при столкновении двух частиц рождение *пары* частиц. При многократном повторении такого процесса могут возникнуть столько пар частиц, сколько допускают законы сохранения. Как и в разделе Iа, модифицируем взаимодействие (35), потребовав, чтобы операторы a_k^* всегда стояли слева от операторов a_k. Подставляя в (35) выражения (4)–(6), получаем

$$\eta = \frac{\lambda^2}{V^3} \sum_{k_1,\ldots,k_6} \int d\mathbf{r}\, dt \frac{\frac{15}{8}(--++++) + \frac{20}{8}(---+++) + \frac{15}{8}(----++)}{\sqrt{k_1^0 k_2^0 \ldots k_6^0}}. \tag{36}$$

Знак $(--++++)$ означает член

$$a_{\mathbf{k}_1}^* a_{\mathbf{k}_2}^* a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_5} a_{\mathbf{k}_6} e^{i(-\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3+\ldots+\mathbf{k}_6)\mathbf{r} - i(-k_1^0-k_2^0+k_3^0+\ldots+k_6^0)t}. \tag{37}$$

Члены, содержащие лишь один плюс или один минус, выпадают из (36) в силу законов сохранения. Коэффициенты 15/8 и 20/8 определяются биномиальными коэффициентами в разложении φ^6. Их можно изменить, не нарушив правильного релятивистского поведения матрицы (36), хотя при этом утрачивается возможность интерпретации матрицы η на основе принципа соответствия, как φ^6.

В выражении (36) правая часть не зависит от углов между направлениями частиц. Следовательно, при столкновении двух частиц так же, как в соотношениях (14) и (15), вклад в рассеяние или рождение пары дает только сферически симметрическая волна («s-состояние»). Значит, собственные значения матрицы η достаточно найти лишь для сферически симметричных решений.

В приводимых ниже вычислениях нам часто будет необходим интеграл по импульсному пространству вида

$$I_n = \int \frac{d\mathbf{k}_1}{k_1^0}\frac{d\mathbf{k}_2}{k_2^0}\cdots\frac{d\mathbf{k}_n}{k_n^0}\delta\left(\mathbf{K}-\sum k_i\right)\delta\left(K^0-\sum k_i^0\right). \tag{38}$$

Этот интеграл легко берется только при $n = 2$. Однако для нашей цели достаточно вычислить его в двух предельных случаях: во-первых, когда запас полной энергии очень велик по сравнению с энергией покоя частиц, и, во-вторых, когда полная энергия лишь незначительно превышает энергию покоя частиц. Вычисление интеграла подробно изложено в приложении I. Здесь же мы приведем только конечные результаты — соотношения (120) и (122), причем для простоты положим $\mathbf{K} = 0$ (система центра масс):

$$I_n = \begin{cases} \dfrac{2\pi^{n-1}K^{0\,2n-4}}{(n-1)!(n-2)!} & \text{при } \varkappa \ll K^0,\ \mathbf{K}=0, \\ \dfrac{(2\pi)^{3(n-1)/2}\varkappa^{(n-3)/2}(K^0-n\varkappa)^{(3n-5)/2}}{n^{3/2}\left(\frac{3n-5}{2}\right)!} & \text{при } K^0-n\varkappa \ll \varkappa,\ \mathbf{K}=0. \end{cases} \tag{39}$$

$$I_2 = 2\pi\sqrt{1-\left(\frac{2\varkappa}{K^0}\right)^2}. \tag{40}$$

Приводимые ниже вычисления также проведены отдельно для двух предельных случаев: а) энергии двух сталкивающихся частиц как раз достаточно для рождения одной пары ($K^0 \approx 4\varkappa$); б) энергия сталкивающих частиц очень велика по сравнению с массой покоя.

а) Рождение пары частиц

Чтобы максимально упростить задачу, мы в этом разделе будем производить вычисления, отбрасывая в (36) член $(---+++)$. Иначе говоря, нас будет интересовать, к каким физическим следствиям приводит соотношение (36), в правой части которого стоят только члены $(--++++)$ и $(----++)$.

Собственные значения оператора η в (36) можно определить, решив уравнение Шредингера в переменных, на которые действует оператор η. Такими переменными служат числа $N_{\mathbf{k}}$ частиц, обладающих импульсом $\mathbf{K}$. Итак, введем функцию Шредингера $\psi(N_1, N_2, \ldots)$ от чисел $N_1, N_2, \ldots$. Функция $\psi(N_1, N_2, \ldots)$ задает вероятность того, что существует N_1 частиц с импульсом $\mathbf{k}_1$, N_2 частиц с импульсом $\mathbf{k}_2$ и т. д. Покажем, что в рассматриваемом нами частном случае решение уравнения

Шредингера имеет вид

$$\psi(N_1, N_2, \dots) = \sqrt{\frac{n!}{N_1!N_2!\dots}} \frac{a'_n}{\sqrt{k_1^0 k_2^0 \dots k_n^0}}, \tag{41}$$

где $n = N_1 + N_2 + \dots$ — полное число частиц, а амплитуды a'_n не зависят от импульсов частиц.

Если, как мы предположили, K^0 лишь немного больше $4\varkappa$ (напомним, что $\mathbf{K} = 0$), то от нуля отличны только a'_2 и a'_4. Из (36) следует, что уравнение Шредингера принимает в этом случае вид

$$\begin{aligned} a'_2\eta &= \frac{15}{8}\lambda^2 2\sqrt{4\cdot 3} \sum_{\mathbf{k}_3,\dots,\mathbf{k}_6} \frac{a'_n(2\pi)^4\delta(\mathbf{K}-\sum\mathbf{k}_i)\delta(K^0-\sum k_i^0)}{k_3^0\dots k_6^0 V^3} = \frac{15}{8}\lambda^2 2\sqrt{4\cdot 3}\frac{V}{(2\pi)^8} I_4 a'_4, \\ a'_4\eta &= \frac{15}{8}\lambda^2 \frac{24}{\sqrt{4\cdot 3}} \sum_{\mathbf{k}_5,\mathbf{k}_6} \frac{a'_2(2\pi)^4\delta(\mathbf{K}-\sum\mathbf{k}_i)\delta(K^0-\sum k_i^0)}{k_5^0 k_6^0 V^3} = \frac{15}{8}\lambda^2 \frac{24}{\sqrt{4\cdot 3}} \frac{1}{V(2\pi)^2} I_2 a'_2. \end{aligned} \tag{42}$$

В правые части этих уравнений импульсы отдельных частиц уже входят. Следовательно, функция (41) действительно удовлетворяет уравнению Шредингера. Уравнения (42) представляют собой не что иное, как систему двух линейных уравнений для определения двух неизвестных a'_2 и a'_4. Для собственных значений получаем

$$\eta^2 = \left(\frac{15}{8}\lambda^2\right)^2 \frac{2\cdot 24}{(2\pi)^{10}} I_2 I_4, \qquad \eta = \pm\frac{15\sqrt{3}}{2}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\sqrt{I_2 I_4}; \tag{43}$$

$$a'_4 = \pm\frac{(2\pi)^3}{V} a'_2 \sqrt{\frac{I_2}{I_4}}. \tag{44}$$

Относительные вероятности встретить, соответственно, 2 и 4 частицы равны

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2} \frac{|a'_2|^2}{k_1^0 k_2^0}\delta\left(\mathbf{K}-\sum\mathbf{k}_i\right)\delta\left(K^0-\sum k_i^0\right) &= |a'_2| I_2 \frac{V^2}{(2\pi)^6}, \\ \sum_{\mathbf{k}_1,\dots,\mathbf{k}_4} \frac{|a'_4|^2}{k_1^0\dots k_4^0}\delta\left(\mathbf{K}-\sum\mathbf{k}_i\right)\delta\left(K^0-\sum k_i^0\right) &= |a'_4| I_4 \frac{V^4}{(2\pi)^{12}}. \end{aligned} \tag{45}$$

Удобно ввести следующие обозначения:

$$a_n = a'_n \left[\frac{V}{(2\pi)^3}\right]^{n/2} \sqrt{I_n}. \tag{46}$$

Тогда $|a_n|^2$ совпадает с вероятностью найти n частиц. Из (44) и (46) следует, что

$$\frac{|a_4|^2}{|a_2|^2} = 1, \quad \text{т.е.} \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad a_4 = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{47}$$

Таким образом, в каждом из двух собственных состояний с равной вероятностью можно найти 2 или 4 частицы. Вероятность рождения пары частиц мы получим,

вычислив элементы матрицы $S = e^{i\eta}$. Из (43) и (47) находим ($S_{nm} = \sum_\eta a^*_{n\eta} e^{i\eta} a_{m\eta}$)

$$S_{22} = \cos\left(\frac{15\sqrt{3}}{2}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\sqrt{I_2 I_4}\right),$$
$$S_{24} = i\sin\left(\frac{15\sqrt{3}}{2}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^2}\sqrt{I_2 I_4}\right), \qquad (48)$$

поэтому сечение рождения пары равно

$$Q_{\text{рожд. пары}} = \frac{\pi}{k'^2}\sin^2\left(\frac{15\sqrt{3}}{2}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\sqrt{I_2 I_4}\right). \qquad (49)$$

Когда значение K^0 полной энергии приближается к $4\varkappa$, это сечение обращается в нуль, как $(K^0 - 4\varkappa)^{7/2}$ (см. (59)). Однако в зависимости от значения постоянной λ сечение рождения пары может обращаться в нуль при нескольких других больших значениях сталкивающихся частиц.

Сечение рассеяния оказывается равным

$$Q_{\text{расс}} = \frac{4\pi}{k'^2}\sin^4\left(\frac{15\sqrt{3}}{4}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\sqrt{I_2 I_4}\right). \qquad (50)$$

Сечение $Q_{\text{расс}}$ также обращается в нуль вместе с I_4, поскольку в силу принятых нами предположений рассеяние осуществляется косвенно через рождение виртуальной пары.

Сохранение в правой части (56) члена вида $(- - - + + +)$ значительно усложнило бы все соотношения. Решение уравнения Шредингера не имело бы вид (41), так как при $n = 4$ в правую часть (42) входит член, зависящий от импульсов частиц.

б) Множественное рождение частиц

В отличие от предыдущего раздела, предположим, что масса покоя частиц очень мала по сравнению с их полной энергией, и поэтому запаса полной энергии оказывается достаточно для рождения за один акт столкновения очень большого числа частиц. В качестве взаимодействия примем сначала взаимодействие (36) с полным набором членов.

α) Множественное рождение частиц при взаимодействии (36). Получить точное решение уравнения Шредингера в этом случае не удается, даже если в первом приближении положить $\varkappa = 0$, но приближенное решение вида (41) можно получить по методу Ритца: допустить к сравнению только волновые функции вида (41) и искать те значения коэффициентов a'_n, при которых среднее оператора достигает экстремума.

Итак, как в (41) и (46), необходимо взять функцию

$$\psi(N_1, N_2, \ldots) = \sqrt{\frac{n!}{N_1!N_2!\ldots}}\frac{a'_n}{\sqrt{k_1^0 k_2^0\ldots}} = a_n\left(\frac{n!(2\pi)^{3n}}{N_1!N_2!\ldots k_1^0\ldots k_n^0 V^n I_n}\right)^{1/2}. \qquad (51)$$

Для среднего значения оператора η получаем

$$\sum \eta a_n^* a_n = \sum_n \frac{15}{8}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\frac{\sqrt{n!(n+2)!}}{(n-2)!}\frac{a_n^* a_{n+2}}{\sqrt{I_n I_{n+2}}}\times$$
$$\times\int\frac{d\mathbf{k}_1}{k_1^0}\cdots\frac{d\mathbf{k}_{n-2}}{k_{n-2}^0}\int\frac{d\mathbf{k}'_{n-1}}{k_{n-1}^{0\,\prime}}\frac{d\mathbf{k}'_n}{k_n^{0\prime}}\int\frac{d\mathbf{k}''_{n-1}}{k_{n-1}^{0\,\prime\prime}}\cdots\frac{d\mathbf{k}''_{n+2}}{k_{n+2}^{0\,\prime\prime}}[\delta]+$$
$$+\frac{20}{8}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\frac{n!}{(n-3)!}\frac{a_n^* a_n}{I_n}\int\frac{d\mathbf{k}_1}{k_1^0}\cdots\frac{d\mathbf{k}_{n-3}}{k_{n-3}^0}\int\frac{d\mathbf{k}'_{n-2}}{k_{n-2}^{0\,\prime}}\cdots\frac{d\mathbf{k}'_n}{k_n^{0\prime}}\int\frac{d\mathbf{k}''_{n-2}}{k_{n-2}^{0\,\prime\prime}}\cdots\frac{d\mathbf{k}''_n}{k_n^{0\prime\prime}}[\delta]+$$
$$+\frac{15}{8}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^5}\frac{\sqrt{(n-2)!n!}}{(n-4)!}\frac{a_n^* a_{n-2}}{\sqrt{I_n I_{n-2}}}\int\frac{d\mathbf{k}_1}{k_1^0}\cdots\frac{d\mathbf{k}_{n-4}}{k_{n-4}^0}\int\frac{d\mathbf{k}'_{n-3}}{k_{n-3}^{0\,\prime}}\cdots\frac{d\mathbf{k}'_n}{k_n^{0\prime}}\int\frac{d\mathbf{k}''_{n-3}}{k_{n-3}^{0\,\prime\prime}}\frac{d\mathbf{k}''_{n-2}}{k_{n-2}^{0\,\prime\prime}}[\delta], \quad (52)$$

где $[\delta]$ в правой части — сокращенное обозначение выражения

$$[\delta]=\delta\left(\sum\mathbf{k}+\sum\mathbf{k}'\right)\delta\left(K^0-\sum k^0-\sum k^{0\prime}\right)\times$$
$$\times\,\delta\left(\sum\mathbf{k}'-\sum\mathbf{k}''\right)\delta\left(\sum k^{0\prime}-\sum k^{0\prime\prime}\right). \quad (53)$$

Вычисляя интегралы по формуле (53), преобразуем (52) к виду

$$\sum\eta a_n^* a_n=\frac{15}{16}\frac{\lambda^2}{(2\pi)^3}K^{0^2}\sum_n\Big[\sqrt{(n+2)(n-1)}a_n^* a_{n+2}+$$
$$+4(n-2)a_n^* a_n+\sqrt{n(n-3)}a_n^* a_{n-2}\Big]. \quad (54)$$

Если ввести для краткости обозначение

$$\zeta=\eta\frac{16}{15}\frac{(2\pi)^3}{\lambda^2 K^0}, \quad (55)$$

то из требования экстремальности получаем уравнение Шредингера

$$\zeta a_n=\sqrt{(n+2)(n-1)}a_{n+2}+4(n-2)a_n+\sqrt{n(n-3)}a_{n-2}.$$

Полагая

$$a_n=\frac{\left(\frac{n-1}{2}\right)!2^{(n-1)/2}}{\sqrt{n!(n-1)}}b_n, \quad (56)$$

запишем его в менее громоздком виде

$$\zeta b_n=(n-1)b_{n+2}+4(n-2)b_n+nb_{n-2}. \quad (57)$$

Это уравнение допускает точное решение. Чтобы найти его, представим b_n в виде

$$b_n=\oint\frac{dt}{t^{n+1}}f(t). \quad (58)$$

Подставив (58) в уравнение (57) и проинтегрировав по частям, получим для $f(t)$ дифференциальное уравнение

$$f't\left(1+4t^2+t^4\right)=f\left[3+(\zeta+8)t^2-2t^4\right] \quad (59)$$

с решением

$$f(t) = t^3\left(t^2+2+\sqrt{3}\right)^{-\frac{5}{4}-\frac{\zeta+6}{4\sqrt{3}}}\left(t^2+2-\sqrt{3}\right)^{-\frac{5}{4}+\frac{\zeta+6}{4\sqrt{3}}}. \tag{60}$$

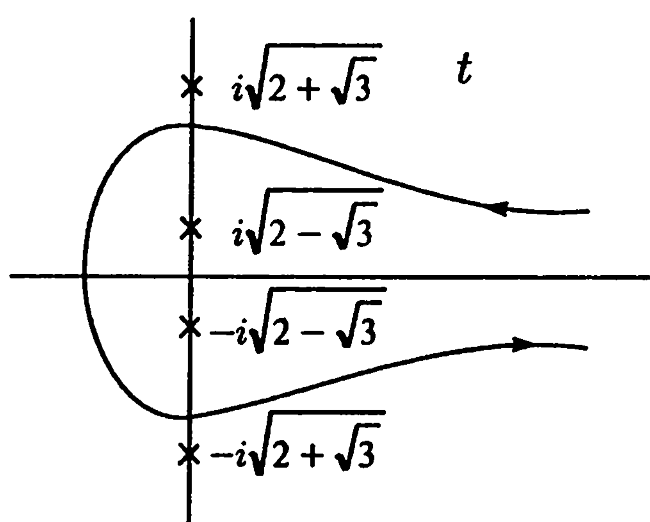


Рис. 2

Если интеграл в (58) брать по контуру, изображенному на рис. 2, то при больших n коэффициенты b_n будут убывать с возрастанием n как $(2+\sqrt{3})^{-n/2}$.

Именно такой закон убывания b_n следует потребовать в качестве граничного условия к уравнению Шредингера (57), так как другое решение, при котором b_n экспоненциально возрастают с увеличением n нельзя было бы нормировать (и при всех конечных n пришлось бы положить $b_n = 0$). Решения уравнения (57), как нетрудно видеть, распадаются на две независимые группы, а именно: решения только с четными и только с нечетными n. Поскольку мы намерены исследовать столкновение двух частиц, нас будут интересовать только решения первой группы. Итак, пусть

$$b_n = \begin{cases} 0 & \text{при нечетных } n, \\ \displaystyle\int \frac{dt}{t^{n+1}} f(t) & \text{при четных } n. \end{cases} \tag{61}$$

Решение уравнения (57) (так же, как и все обычные функции Шредингера квантовой механики) должно удовлетворять краевому условию не только на бесконечности, но и при $n = 0$ должно выполняться равенство $b_0 = 0$, так как в противном случае при $n = 2$ нарушилось бы уравнение (57) (существование 0 частиц запрещено законами сохранения). Равенство $b_0 = 0$ определяет (при заданном контуре интегрирования, изображенном на рис. 2) собственное значение ζ (и тем самым матрицу η) уравнения (57).

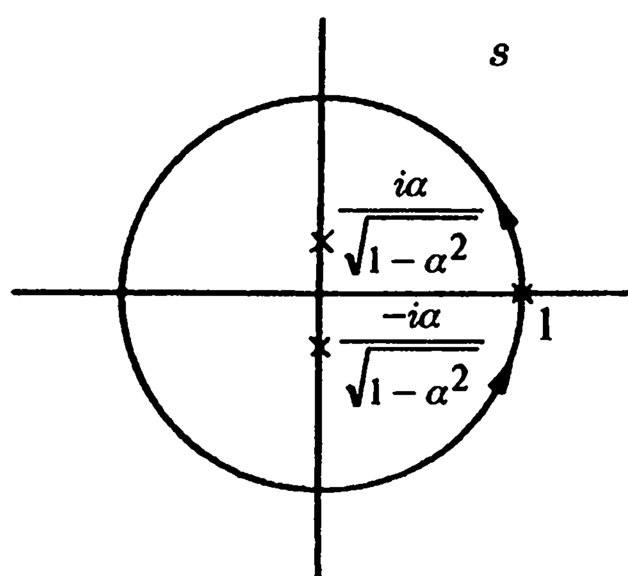


Рис. 3

Выражение (58) можно несколько упростить, если вместо t ввести новую переменную интегрирования, задав ее при помощи соотношения

$$\zeta = \frac{t}{\sqrt{t^2+\frac{1}{\alpha}}}, \tag{62}$$

где $\alpha = 2-\sqrt{3}$, $\frac{1}{\alpha} = 2+\sqrt{3}$. Произведя замену переменной, получим из (58) и (60)

$$b_n = \oint ds\, s^{\xi-1}\left[1-\alpha^2+\frac{\alpha^2}{s^2}\right]^{(\xi-3)/2}\left[\alpha\left(\frac{1}{s^2}-1\right)\right]^{n/2}, \tag{63}$$

где

$$\xi = \frac{1}{2}+\frac{\zeta-6}{2\sqrt{3}}.$$

Контур интегрирования показан на рис. 3. В качестве граничного условия для определения собственных значений ξ

$$b_0 = \oint ds\, s^{\xi-1}\left[1-\alpha^2+\frac{\alpha^2}{s^2}\right]^{(\xi-3)/2} = 0. \tag{64}$$

Так как $\alpha = 0{,}268$, то $\alpha^2 = 0{,}0718$, и можно разлагать по степеням α^2 в надежде, что уже первый член разложения позволит достичь точность, достаточную для качественных выводов. Собственные значения ξ оказываются равными

$$\xi = l\left(-\alpha^l \frac{\left(\frac{l-3}{2}\right)!}{\left(\frac{l}{2}\right)!\left(-\frac{3}{2}\right)}\right), \tag{65}$$

где l — любое положительное целое четное число ($l = 2, 4, 6, \dots$). Приведем их численные значения:

$$\begin{aligned} \xi &= 2{,}072;\ 4{,}003;\ 6{,}000;\ 8{,}000;\ \dots, \\ \zeta &= -0{,}55;\ 6{,}12;\ 13{,}00000;\ 20{,}0;\ \dots . \end{aligned} \tag{66}$$

Как показывает исходное выражение (55), оператор η должен быть положительно определен, что на первый взгляд противоречит отрицательности низшего собственного значения (см. (66)). Причина кажущегося противоречия заключается в том, что в действительности мы исходили не из оператора, задаваемого соотношением (35), а из взаимодействия, которое получается из (35) при перестановке операторов и соответствует выражению (35) лишь при высших квантовых числах.

Решение (63) необходимо еще нормировать. Поскольку для этого нам потребуется составить ряд

$$\sum_n |a_n|^2 = \sum_n \frac{\left[\left(\frac{n-1}{2}\right)!\right]^2 2^{n-1}}{n!(n-1)} |b_n|^2, \tag{67}$$

воспользуемся соотношением

$$\sum_{n=2,4,6,\dots} \frac{\left[\left(\frac{n-1}{2}\right)! 2^{n-1}\right]}{n!(n-1)} z^n = -\frac{\pi}{2}\sqrt{1-z^2} \quad \text{при} \quad |z| < 1. \tag{68}$$

Из него и соотношения (63) следует, что

$$\sum_n |a_n|^2 = -\frac{\pi}{2} \int ds\, s^2 \int dt\, t^2 \sqrt{1 - \alpha^2 \frac{(1-s^2)(1-t^2)}{s^2 - t^2}} \times \\ \times \left\{ \left[\alpha^2 + (1-\alpha^2)s^2\right]\left[\alpha^2 + (1-\alpha^2)t^2\right] \right\}^{(\xi-3)/4} \tag{69}$$

(суммирование проводится только по целым n). При интегрировании по t направление обхода должно быть противоположным направлению обхода, выбранному при интегрировании по s, так как отдельные члены в правой части (67) имеют вид $b_n^* b_n$. Полагая

$$\alpha^2 + \left(1 - \alpha^2\right)s^2 = u, \quad \alpha^2 + \left(1 - \alpha^2\right)t^2 = v, \tag{70}$$

получаем после несложных вычислений

$$\sum_n |a_n|^2 = -\frac{\pi}{2(1-\alpha^2)^3} \int du \int dv (uv)^{(\xi-3)/2} \sqrt{uv - \alpha^2}. \tag{71}$$

В приближении, в котором ξ можно положить равным просто положительному четному числу, точное равенство (71) можно заменить следующим:

$$\sum |a_n|^2 \approx -\frac{2\pi^3}{(1-\alpha^2)^3} \binom{1/2}{\xi/2} \left(-\alpha^2\right)^{\xi/2}. \tag{72}$$

Лишь для низшего собственного значения погрешность этой приближенной формулы достигает нескольких процентов.

С той же точностью получаем из (63) следующие выражения для коэффициентов a_n:

$$a_n = \begin{cases} \left(1-\alpha^2\right)^{3/2} & \text{при } n=\xi, \\ \binom{n/2}{\xi/2}(-1)^{(n-\xi)/2}\frac{\left(\frac{n-1}{2}\right)!}{\left(\frac{\xi-1}{2}\right)!}\sqrt{\frac{\xi!(\xi-1)}{n!(n-1)}}2^{(n-\xi)/2}\alpha^{(n-\xi)/2}\left(1-\alpha^2\right)^{3/2} & \text{при } n\geqslant\xi, \\ \binom{(\xi-3)/2}{(\xi-n)/2}\frac{\left(\frac{n-1}{2}\right)!}{\left(\frac{\xi-1}{2}\right)!}\sqrt{\frac{\xi!(\xi-1)}{n!(n-1)}}2^{(n-\xi)/2}\alpha^{(\xi-n)/2}\left(1-\alpha^2\right)^{3/2} & \text{при } n\leqslant\xi \end{cases} \tag{73}$$

(ξ и n всегда положительные и четные).

Нетрудно видеть, что коэффициенты a_n имеют максимум в точке $n=\xi$, справа и слева от которой они убывают по все возрастающей степени параметра α.

Вероятность рождения n частиц при рассеянии также находим из элементов матрицы S:

$$S_{2,n} = \sum_\xi a^*_{2,\xi}e^{i\eta}a_{n,\xi}. \tag{74}$$

Так как из (55) и (63) следует, что

$$\eta = \frac{15}{16}\frac{\lambda^2K^{0^2}}{(2\pi)^3}\left[-6+2\sqrt{3}\left(\xi-\frac{1}{2}\right)\right],$$

то

$$S_{2,n} = \exp\left\{-\frac{15}{16}\frac{\lambda^2K^{0^2}}{(2\pi)^3}(6+\sqrt{3})i\right\}\sum_\xi a^*_{2\xi}e^{iA\xi}a_{n\xi}, \tag{75}$$

где

$$A = \frac{15\sqrt{3}}{8}\frac{\lambda^2K^{0^2}}{(2\pi)^3}. \tag{76}$$

Подставляя (73) в (75), получаем с точностью до высших членов относительно α^2

$$\sum a^*_{2\xi}e^{iA\xi}a_{n\xi} = \left(1-\alpha^2\right)^3\alpha^{(n-2)/2}\frac{2^{n/2+1}\left(\frac{n-1}{2}\right)!(-1)^{n/2}}{\pi\sqrt{2(n-1)n!}}\sum_\xi \xi\binom{n/2}{\xi/2}\left(e^{-2iA}\right)^\xi =$$
$$= \left(1-\alpha^2\right)^3\alpha^{(n-2)/2}\frac{2^{n/2+1}\left(\frac{n-1}{2}\right)!(-1)^{n/2}}{\pi\sqrt{2(n-1)n!}}\frac{n}{2}\left(1-e^{2iA}\right)^{n/2-1}. \tag{77}$$

Наконец, в том же приближении получаем для вероятности $w_n = |S^2_{2,n}|$ рождения n частиц выражение

$$w_n = \frac{2n^2}{\pi}\binom{1/2}{n/2}(-1)^{n/2+1}(2\alpha\sin A)^{n-2}\left(1-\alpha^2\right)^6. \tag{78}$$

Конечная формула (78) показывает, что при выбранном нами за исходное взаимодействии (36) взрывообразные множественные процессы *не возникают.* Это

утверждение остается в силе независимо от величины постоянной λ или энергии K^0. Действительно, из (78) прежде всего следует, что при малых значениях λ, т. е. при малых значениях A, вероятности $w_4, w_6, \ldots$ малы и имеют порядок $A^2, A^4, \ldots$. К единице приближается только вероятность w_2. (Из формулы (78) этого не видно, так как она соответствует лишь первому приближению.) При $n = 2$ формула (78) дает независимо от A значение $w_2 = 0{,}82$. По отклонению w_2 от единицы можно судить о точности формулы (78), которая за счет суммирования при вычислении промежуточных результатов (74)–(77) стала значительно меньше, чем точность формул (65), (72) и (75). Но и при максимальном значении A, а именно, при $\sin A = 1$, вероятности ведут себя примерно следующим образом: $w_2 = 0{,}82$; $w_4 = 0{,}23$; $w_6 = 0{,}084$ и т. д., т. е. с ростом n вероятности w_n быстро убывают. Среднее число частиц составляет около 3.

Полученный нами результат несколько расходится с тем, что можно было бы ожидать, исходя из типа взаимодействия (36) (постоянная λ имеет размерность длины), а именно: истинно множественного рождения новых частиц при достаточно высокой энергии сталкивающихся частиц. Вместе с тем из соотношения (78) видно, что скорость убывания вероятностей w_n с ростом n зависит от численного значения постоянной α и, следовательно, от выбора коэффициентов в уравнении Шредингера (57). Это означает, что необходимо считаться с возможностью возникновения других процессов при ином выборе коэффициентов. В нашем случае численные значения коэффициентов были выбраны лишь по аналогии с взаимодействием $\int dr\, dt \varphi^6$, в то время как одни лишь требования теории относительности и квантовой теории ничего не говорят о значениях коэффициентов. Поэтому мы займемся сейчас исследованием тех изменений, которые возникают при варьировании коэффициента при среднем члене в правой части (57).

β) *Множественное рождение частиц при модифицированном взаимодействии.* Подставим вместо коэффициента при среднем члене в правой части (57), равного 4, неопределенное значение $4a$, и выясним, как ведут себя b_n при очень больших n. Полагая

$$b_n = g(n)x^n, \tag{80}$$

где функция $g(n)$ должна медленно изменяться в пределе при больших n, и отбрасывая в (57) все члены низшего порядка, получаем характеристическое уравнение

$$1 + 2ax^2 + x^4 = 0 \tag{81}$$

с решением

$$x^2 = -a \pm \sqrt{a^2 - 1}. \tag{82}$$

Правая часть равенства (82) может быть вещественной, как в рассмотренном нами случае $a = 2$. Тогда одно решение больше единицы, другое — меньше единицы, и b_n с возрастанием n либо экспоненциально возрастает, либо экспоненциально убывает. Но правая часть равенства (82) может быть и комплексной (при $|a| < 1$). Тогда оба решения по абсолютной величине равны единице, т. е. $|x| = 1$. Оба решения уравнения (57) при этом одинаково ведут себя на бесконечности в отношении сходимости, поэтому необходимость в постановке краевого условия на бесконечности отпадает. Спектр собственных значений непрерывен, краевое условие $b_0 = 0$ определяет только решение уравнения (57) с соответствующим значением ζ. Таким образом, случаи $|a| > 1$ и $|a| < 1$ относятся друг у другу, как, например, дискретный и непрерывный спектр собственных значений атома водорода. Напрашивается мысль о том, что при непрерывном спектре, т. е. при $|a| \leqslant 1$ решения уравнения (57) описывают множественное рождение частиц, в то время как в случае

дискретного спектра ($|a| > 1$) решения ведут себя качественно так же, как это описано в предыдущем разделе. Исследуем теперь предельный случай $a = 1$, при котором, как следует из (82), спектр уже непрерывен. В качестве исходного мы выбираем взаимодействие

$$\eta = \frac{\lambda^2}{V^3} \sum_{k_1,\dots,k_6} \int \frac{dr\, dt\, \frac{15}{8}(--++++) + \frac{10}{8}(---+++) + \frac{15}{8}(----++)}{\sqrt{k_1^0, \dots, k_6^0}}. \tag{83}$$

Решение получаем точно так же, как в предыдущем разделе. Уравнение Шредингера имеет вид

$$\zeta b_n = (n-1)b_{n+2} + 2(n-2)b_n + nb_{n-2}. \tag{84}$$

Подставляя (58), сводим его к уравнению

$$f't\left(1 + 2t^2 + t^4\right) = f\left[3 + (4+\zeta)t^2 - 2t^4\right], \tag{85}$$

допускающему решение

$$f = t^3\left(1+t^2\right)^{-5/2} \exp\left\{-\frac{\zeta+3}{2(1+t^2)}\right\} \tag{86}$$

Вводя новую переменную

$$s = \frac{t}{\sqrt{1+t^2}}, \tag{87}$$

получаем

$$b_n = \int ds\, s^2 \left(\frac{1}{s^2} - 1\right)^{n/2} \exp\left\{\frac{\zeta+3}{2}\right\}\left(s^2 - 1\right). \tag{88}$$

Контур интегрирования необходимо выбрать так, чтобы при интегрировании по частям внеинтегральные члены уничтожились. В остальном пределы интегрирования произвольны. При $\frac{\zeta+3}{2} > 0$ наиболее общее решение уравнения (57) (с точностью до тривиального постоянного множителя) имеет вид

$$b_n = \left(\int_{-1}^{+1} + \gamma \int_{-i\infty}^{+i\infty}\right) ds\, s^2 \left(\frac{1}{s^2} - 1\right)^{n/2} \exp\left\{\frac{\zeta+3}{2}(s^2 - 1)\right\}. \tag{89}$$

Постоянную γ необходимо выбрать так, чтобы обратить в нуль b_0. Тем самым решение будет определено с точностью до нормировочного множителя. Положим для краткости

$$\xi = \frac{\zeta+3}{2}. \tag{90}$$

Тогда при $n = 0$

$$\int_{-i\infty}^{+i\infty} ds\, s^2 e^{\xi(s^2-1)} = -\frac{i}{2}\sqrt{\pi}\xi^{-3/2}e^{-\xi}, \tag{91}$$

следовательно,

$$\gamma = -i\frac{2}{\sqrt{\pi}}\xi^{3/2} \int_{-1}^{+1} ds\, s^2 e^{\xi s^2}. \tag{92}$$

Из (89) получаем простые выражения для низших коэффициентов b_n: $b_2 = 2$, $b_4 = 4\xi - 6$ и т.д., b_n — полином степени $(n-2)/2$ (см. приложение II).

Для дальнейших исследований необходимо прежде всего установить, как b_n ведут себя при больших n. Ответ на этот вопрос проще всего получить, вычислив интеграл (89) по методу перевала. Седловые точки соответствуют четырем значениям

$$s_0 \approx \frac{\pm 1 \pm i}{\sqrt{2}} \sqrt[4]{\frac{n}{2\xi}}, \tag{93}$$

подынтегральное выражение правой части (89) ведет себя в этих точках, как

$$\pm i \sqrt{\frac{n}{2\xi}} (-1)^{n/2} \exp\left\{ \pm i\sqrt{2n\xi} - \frac{\xi}{2} + 4\xi(s-s_0)^2 + \ldots \right\}. \tag{94}$$

Интеграл (89) берется по контуру, изображенному на рис. 4. При больших n получаем:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} &\approx (-1)^{n/2} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{n\pi}{2}} \cos\sqrt{2n\xi}\, e^{-\xi/2}, \\ \int_{-i\infty}^{+i\infty} &\approx -i(-1)^{n/2} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{n\pi}{2}} \sin\sqrt{2n\xi}\, e^{-\xi/2}. \end{aligned} \tag{95}$$

Из (89), (92) и (95) следует конечный результат:

$$b_n \approx (-1)^{n/2} \frac{1}{\xi} \sqrt{\frac{n\pi}{2}} e^{-\xi/2} \left(\cos\sqrt{2n\xi} - \xi^{3/2} \sin\sqrt{2n\xi} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{-1}^{+1} ds\, s^2 e^{\xi s^2} \right) \tag{96}$$

(при $n \to \infty$).

Если провести аналогичные вычисления при отрицательных значениях ξ, то вместо периодической функции $e^{\pm i\sqrt{2n\xi}}$ мы получим экспоненту $e^{\pm i\sqrt{-2n\xi}}$. Коэффициенты b_n при больших n возрастают, как $e^{+\sqrt{-2n\xi}}$, что противоречит краевым условиям. Это утверждение справедливо при любом отрицательном значении ξ. Следовательно, при отрицательных ξ уравнение Шредингера (84) не имеет решений, удовлетворяющих граничным условиям; непрерывный спектр собственных значений охватывает только все положительные значения ξ.

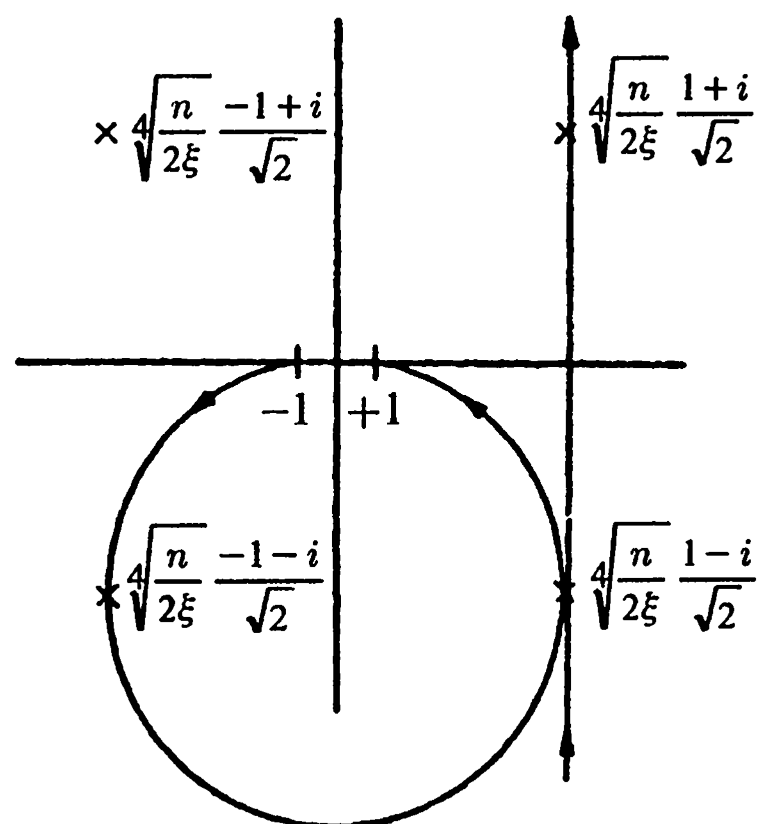


Рис. 4

Из (56) и (96), используя формулу Стирлинга, получаем

$$a_n \approx (-1)^{n/2} \frac{1}{\xi} \sqrt[4]{\frac{\pi^3}{8n}} e^{-\xi/2} \left(\cos\sqrt{2n\xi} - \xi^{3/2} \sin\sqrt{2n\xi} \int_{-1}^{+1} ds\, s^2 e^{\xi s^2} \right) \tag{97}$$

(при $n \to \infty$).

Ряд $\sum_n |a_n|^2$ при больших n расходится. Этого следовало ожидать, коль скоро спектр непрерывен, так как, например, в случае непрерывного спектра функция Шредингера для атома водорода в обычном смысле не нормируема. Чтобы осуществить нормировку при непрерывном спектре, можно либо рассмотреть конечный интервал ξ, либо произвольно ввести нормировочный объем и тем самым искусственно превратить спектр в дискретный. В нашем случае нормировочному объему соответствовало бы существование максимального числа N частиц. Гипотезе о существовании максимального N можно придать физический смысл, если учесть, что отношение $K^0/\varkappa$ устанавливает максимальное число частиц, определяемое законами сохранения, которое, хотя и очень велико, но отнюдь не обязательно должно быть бесконечно большим. Итак, будем считать, что существует максимальное конечное число частиц N, которое очень велико. Тогда спектр собственных значений ξ дискретен и собственные значения определяются соотношением

$$\sqrt{2N\xi} = \pi l + \delta(\xi) \quad (l \text{ — целое число}), \tag{98}$$

следующим из (97), причем постоянная фаза медленно изменяется в зависимости от ξ. Так как N очень велико, то приближенно можно произвести замену

$$\sum_\xi \to \frac{\sqrt{2N}}{2\pi} \int \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}. \tag{99}$$

Для нормировки получаем из (97)

$$\sum_n^N |a_n|^2 = \frac{1}{2\xi^2}\sqrt{\frac{\pi^3 N}{8}} e^{-\xi}\left[1 - \left(\xi^{3/2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-1}^{+1} ds\, s^2 e^{\xi s^2}\right)^2\right]. \tag{100}$$

Нормированное решение имеет вид

$$a_n = \frac{(-1)^{n/2}\sqrt{2}}{\sqrt[4]{nN}} \cos\left(\sqrt{2n\xi} + \delta\right) \tag{101}$$

(при $n \to \infty$), где

$$\delta = \operatorname{arctg}\left(\xi^{3/2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-1}^{+1} ds\, s^2 e^{\xi s^2}\right). \tag{102}$$

Аналогичным образом получаем из (56), (89) и (100) нормированное значение a_2:

$$a_2 = \xi \sqrt[4]{\frac{32}{\pi N}} e^{\xi/2} \cos\delta. \tag{103}$$

С возрастанием ξ это значение a_2 убывает, как $e^{-\xi/2}$.

После того, как мы составили полное представление о возможных типах поведения решений уравнения Шредингера, можно перейти к вычислению элементов матрицы S и тем самым к вычислению вероятности рождения определенного числа частиц. Из соотношения (55) следует, что фаза η определяется выражением

$$\eta = \frac{15}{16}\frac{\lambda^2 K^{02}}{(2\pi)^3}(2\xi - 3) = B\left(\xi - \frac{3}{2}\right), \tag{104}$$

$$B = \frac{15}{8}\frac{\lambda^2 K^{02}}{(2\pi)^3}. \tag{105}$$

Это означает, что при больших n элемент матрицы S имеет вид

$$S_{2,n} = \frac{\sqrt{2N}}{2\pi}\int\limits_0^\infty \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}} a^*_{2,\xi} e^{i\eta} a_{n,\xi} = \\ = \frac{\sqrt{2N}}{2\pi}\int\limits_0^\infty \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}\xi^4\sqrt{\frac{32}{\pi N}}e^{\xi/2}\cos\delta\frac{(-1)^{n-2}\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi N}}\cos\left(\sqrt{2n\xi}+\delta\right)e^{iB(\xi-3/2)}. \tag{106}$$

При больших значениях B и n этот матричный элемент целесообразно вычислять приближенно по методу перевала, так как подынтегральная функция представляет собой произведение медленно изменяющегося множителя и быстро изменяющегося множителя. Седловая точка находится при $\xi_0 = n/2B^2$. Значение фазы, соответствующее этому значению ξ_0, обозначим δ_0. Тогда

$$w_n = |S_{2,n}|^2 = \left(\frac{2n}{\pi}\right)^{3/2}\frac{e^{\xi_0}}{2B^5}\cos^2\delta_0 \quad \text{при} \quad n \gg 1,\ \frac{K^0}{\varkappa} \gg 2B^2 \gg 1. \tag{107}$$

Ход w_n в зависимости от n показан на рис. 5.

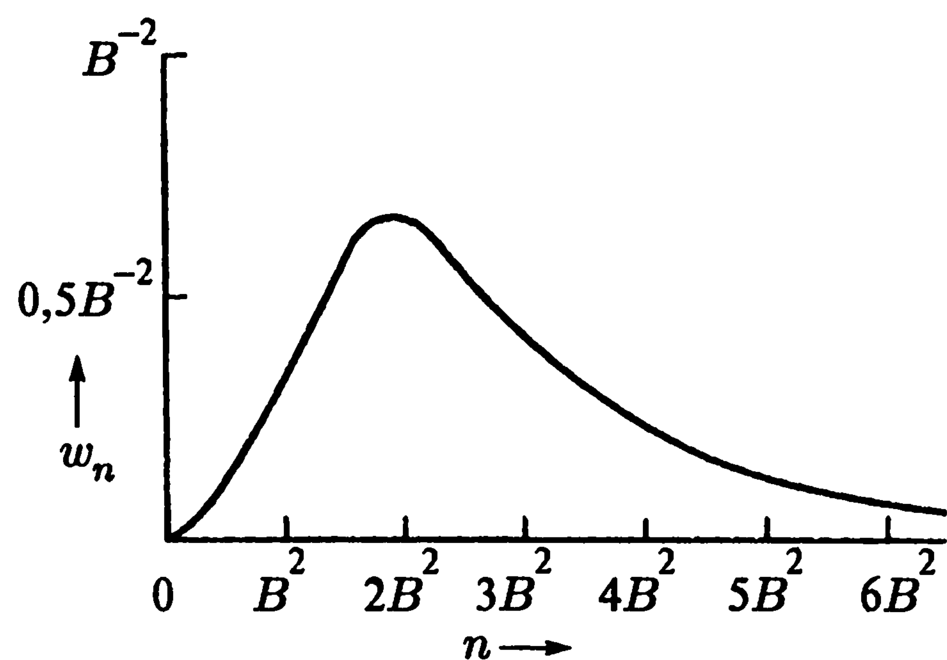


Рис. 5

Мы видим, что вероятность рождения n частиц с увеличением n сначала возрастает до некоторого максимума, соответствующего примерно $2B^2$ частицам, а при большем числе частиц экспоненциально спадает. Среднее число частиц составляет $3B^2$ (см. приложение II, соотношение (126)). При больших B оно очень велико, как и должно быть для того, чтобы выполнялось соотношение (107). Если постоянная λ имеет величину порядка $1/\varkappa$, то B всегда очень велико, коль скоро $K^0 \gg \varkappa$. Условие $K^0/\varkappa \gg 2B^2$, как правило, не выполняется и для того, чтобы была верна формула (107), его необходимо требовать дополнительно, поскольку среднее число частиц не может превосходить максимально возможное число частиц. Если B велико, а неравенство $K^0/\varkappa \gg 2B^2$ не выполнено, то первичная энергия в общем случае распределяется на множество «порций» величиной порядка $\varkappa$, среднее число частиц имеет порядок $K^0/\varkappa$, но этот случай подробно не исследован.

Формула (107) позволяет вычислить распределение энергии возникающих при столкновении частиц. Как следует из (41) и (59), вероятность того, что при столкновении возникает n частиц и любая из n частиц находится в элементарном объеме dk импульсного пространства составляет

$$dw = nw_n\frac{dk}{K^0}\int\frac{dk_2}{k_2^0}\cdots\frac{dk_n}{k_n^0}\frac{1}{I_n}. \tag{108}$$

При $\varkappa \approx 0$ это соотношение с учетом (39) сводится к соотношению

$$dw = w_n\frac{dk}{k}n(n-1)(n-2)\frac{\left(K^{0^2}-2K^0k\right)^{n-3}}{K^{0^{2n-4}}\pi}. \tag{109}$$

Суммируя по n, получаем спектральное распределение. Если вероятны большие значения n, т. е. если выполняются условия, при которых можно пользоваться формулой (109), то подавляющая часть спектральной интенсивности сосредоточена в области малых k порядка $K^0/4B^2$. В этом случае сумму по n, можно заменить интегралом по ξ_0, а вместо $(1-2k/K^0)$ подставить выражение e^{-2k/K^0}. Из (107), (109) и (102) находим число dz частиц с энергией, заключенной в интервале от k до $k+dk$:

$$dz = \frac{32B^6}{K^{0 2}} dk\, k \frac{2}{\pi} \int\limits_0^\infty d\xi \exp\left\{-\frac{4kB^2}{K^0}\xi\right\} \xi^4 \frac{d}{d\xi} \operatorname{arctg}\left(\frac{4}{\sqrt{\pi}} \int\limits_0^{\sqrt{\xi}} ds\, s^2 e^{s^2}\right). \tag{110}$$

В двух предельных случаях выражение (110) удается упростить:

$$dz = \frac{32B^6}{K^{0 2}} dk\, k \left[\frac{79}{8} - \frac{641}{16}\left(\frac{4kB^2}{K^0}\right) + \ldots\right] \quad \text{при} \quad \frac{4kB^2}{K^0} \ll 1, \tag{111}$$

$$dz = \frac{4180B^6}{\pi K^{0 2}} \left(\frac{4kB}{K^0}\right)^{-11/2} k\, dk \quad \text{при} \quad \frac{4kB^2}{K^0} \gg 1. \tag{112}$$

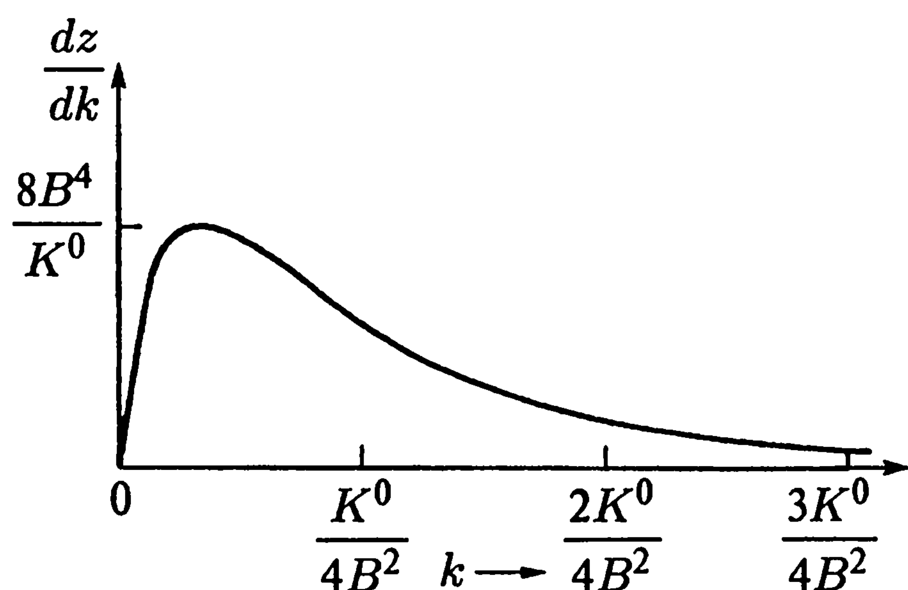


Рис. 6

При величине $(4kB^2/K^0)$ порядка I интеграл (110) можно найти численно. В результате вычислений получается спектр, представленный на рис. 6. Интенсивность, т. е. энергию, приходящуюся на интервал dk, можно найти путем умножения спектральной кривой на k.

Итак, взаимодействие (83) приводит к возникновению взрывообразных процессов множественного рождения, к рождению многих частиц за один единственный акт. Сравнение результатов этого раздела с результатами, полученными в разделе IIб, α отчетливо показывает, каким образом изменение численного значения коэффициента при среднем члене взаимодействия влияет на весь тип решения. Тем самым нами получен ответ на вопрос, поставленный в части I: верно ли, что матрица η, обладающая во всех задачах рассеяния дискретным спектром, может в принципе обладать только дискретным спектром, или же при определенных условиях у нее появляется и непрерывный спектр? Результаты проведенных в этом разделе вычислений показывают, что непрерывный спектр собственных значений может (но не обязательно должен) возникать тогда, когда запаса полной энергии достаточно для рождения бесконечно многих частиц, т. е. если речь идет о частицах с нулевой массой покоя. Если же взаимодействие таково, что приводит к непрерывному спектру собственных значений, то могут возникать истинные процессы множественного рождения, т. е. рождения при каждом акте лишь конечного числа частиц. Если частицы обладают отличной от нуля массой покоя, но запаса полной энергии достаточно для рождения очень большого числа частиц, то, хотя спектр матрицы η всегда дискретен, он состоит из очень большого числа собственных значений, расположенных весьма плотно. Истинные процессы множественного рождения могут возникать и в этом случае, но число частиц ограничено сверху законом сохранения энергии. Выражаясь несколько неточно, можно сказать,

что возникновение взрывообразных процессов множественного рождения непосредственно связано с существованием непрерывного (или почти непрерывного) спектра собственных значений матрицы η.

III
ОБЗОР ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты несколько сложных вычислений предыдущего раздела можно резюмировать следующим образом: если вместо энергии взаимодействия в функции Гамильтона аналогичное выражение задано в качестве η-матрицы, то любая задача, связанная с рассеянием, испусканием и поглощением элементарных частиц, может быть точно решена. Для чистых процессов рассеяния определение собственных значений матрицы η эквивалентно обычному методу разложения падающих волн по сферическим функциям и определения постоянных фаз в отдельных сферических волнах. Для процессов испускания и поглощения задача на собственные значения матрицы взаимодействия не имеет столь простого аналога среди известных ныне методов. Тем не менее при слабом взаимодействии результаты получаются практически такими же, как в современной теории, поскольку в случае очень слабого взаимодействия одна теория переходит в другую.

Все же η-матрица оставляет для будущей теории более широкие рамки, чем функция Гамильтона, поскольку позволяет вводить взаимодействия, не имеющие аналогов в духе принципа соответствия с силами в классических теориях. Такие расширенные взаимодействия могут приводить, например, к сечениям рассеяния, которые в пределе произвольно больших энергий сталкивающихся частиц стремятся к постоянному значению и тем самым позволяют придать ясный физический смысл понятию радиуса частиц.

Наконец, теория с заданной η-матрицей позволяет рассматривать задачи о столкновении двух частиц с очень большой энергией, при котором рождается сразу много новых частиц. Анализ таких процессов принципиально недоступен современной теории из-за трудностей, связанных с появлением расходимостей, и экспериментальных данных о них имеется немного. Матрица же взаимодействия позволяет описывать их до мельчайших подробностей, хотя пока остается неизвестным, допускает ли описание с помощью простой η-матрицы экспериментальное обоснование.

В целом, преимущество рассмотрения физических проблем на основе η-матрицы по сравнению с традиционным подходом состоит в полной устранении всех расходимостей, что позволяет на все физические вопросы давать ответы, заведомо удовлетворяющие требованиям квантовой теории и теории относительности.

Вопрос о виде самой η-матрицы пока остается без ответа, и, как показано в части I, нет оснований ожидать, что матрица взаимодействия будет иметь особенно простой вид. Наоборот, следует предполагать, что построить эту матрицу позволят условия совершенно иного рода.

Другой вопрос, на который пока также не удалось найти ответа, относится к наглядному содержанию теории: поскольку η-матрица не содержит никаких утверждений относительно поведения волновых функций в областях конфигурационного пространства, в которых частицы сближаются, то остается неясным, в какой мере в новой теории вообще возможна пространственно-временная локализация процессов. В то время как для задачи на собственные значения существенна лишь подматрица матрицы η, соответствующая одному вполне определенному значению полной энергии и полного импульса, в вопросах локализации играет роль зависимости между подматрицами с различными значениями энергии-импульса. Исследование этих зависимостей мы вынуждены отложить до следующей работы.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ

I. *Интегралы по импульсному пространству*

$$I_n = \int \frac{d\mathbf{k}_1}{k_1^0} \cdots \frac{d\mathbf{k}_n}{k_n^0} \delta\left(\mathbf{K} - \sum \mathbf{k}_i\right) \delta\left(K^0 - \sum k_i^0\right). \tag{113}$$

При $n = 2$ вычисление интеграла производится элементарно. При $\mathbf{K} = 0$ получаем

$$I_2 = \int \frac{d\mathbf{k}_2}{k_2^{0^2}} \delta(K^0 - 2k_2^0) = 2\pi \sqrt{1 - \left(\frac{2\varkappa}{K^0}\right)^2} \tag{114}$$

при $K = 0$ и находим при помощи преобразования Лоренца (I_n — релятивистский инвариант):

$$I_2 = 2\pi \sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{K^{0^2} - \mathbf{K}^2}}. \tag{115}$$

Высшие интегралы I_n необходимо вычислять отдельно для $\varkappa = 0$ и для $K^0 - n\varkappa \ll \varkappa$.

а) При $\varkappa = 0$ из соображений размерности получаем (при $\mathbf{K} = 0$)

$$I_n = c_n K^{0^{2n-4}}, \tag{116}$$

следовательно, при $\mathbf{K} \neq 0$

$$I_n = c_n \left(K^{0^2} - \mathbf{K}^2\right)^{n-2}. \tag{117}$$

Из (113) и (117) при $\mathbf{K} = 0$ находим

$$I_{n+1} = \int \frac{d\mathbf{k}}{k} c_n \left[(K^0 - k)^2 - k^2\right]^{n-2} = \frac{\pi}{n(n-1)} c_n K^{0^{2n-2}} = c_{n+1} K^{0^{2n-2}}, \tag{118}$$

т. е.

$$c_{n+1} = \frac{\pi}{n(n-1)} c_n. \tag{119}$$

Из (115) и (119) методом полной индукции получаем

$$I_n = \frac{2\pi^{n-1}}{(n-1)!(n-2)!} K^{0^{2n-4}}. \tag{120}$$

б) При $K^0 - n\varkappa \ll \varkappa$ воспользуемся разложением $k^0 = \varkappa + \frac{k^2}{2\varkappa} + \ldots$ и в первом приближении (при $\mathbf{K} = 0$) положим

$$I_n = \varkappa^{-n} (2\pi)^{-4} \int d\mathbf{r} \int dt \int d\mathbf{k}_1 \ldots \mathbf{k}_n \exp\left\{ i\left[-\sum \mathbf{k}_i \mathbf{r} - \left(k^0 - n\varkappa - \sum \frac{k_i^2}{2\varkappa}\right) t \right] \right\}. \tag{121}$$

Интеграл по t необходимо брать от $-\infty$ до $+\infty$ над вещественной осью, чтобы интеграл по $\mathbf{k}_i$ сходился. Производя вычисления, получаем:

$$\begin{aligned} I_n &= \varkappa^{-n} (2\pi)^{-4} \int d\mathbf{r} \int dt \left(\frac{2\varkappa\pi}{it}\right)^{3n/2} \exp\left\{ i\left[-\frac{\varkappa n}{2t} r^2 - (K^0 - n\varkappa) t \right] \right\} = \\ &= \varkappa^{-n} (2\pi)^{-4} \int dt \left(\frac{2\pi\varkappa}{-it}\right)^{3n/2} \left(\frac{2\pi t}{i\varkappa n}\right)^{3/2} \exp\left\{ -i(K^0 - n\varkappa) t \right\} = \\ &= \frac{(2\pi)^{3(n-1)/2} \varkappa^{(n-3)/2} (K^0 - n\varkappa)^{(3n-5)/2}}{n^{\frac{3}{2}} \left(\frac{3n-5}{2}\right)!}. \end{aligned} \tag{122}$$

II. *Полиномы, связанные с уравнением* (84)

Из частного решения (89) разностного уравнения (84) следует, что коэффициент b_n — полином степени $(n/2-1)$ по ξ. Так как $b_2=2$, то несколько первых полиномов легко найти из разностного уравнения

$$(n-1)b_{n+2}+2\left(n-\xi-\frac{1}{2}\right)b_n+nb_{n-2}=0.$$

Получаем:

$$\begin{aligned} b_2&=2,\\ b_4&=4\xi-6,\\ b_6&=\frac{1}{3}\left(8\xi^2-40\xi+34\right),\\ b_8&=\frac{1}{3\cdot 5}\left(16\xi^3-168\xi^2+436\xi-266\right),\\ b_{10}&=\frac{1}{3\cdot 5\cdot 7}\left(32\xi^4-576\xi^3+3\,072\xi^2-5\,472\xi+2\,630\right)\quad \text{и т.д.} \end{aligned} \tag{123}$$

Эти полиномы обладают интересным сходством с известными системами полиномов: сферическими функциями, полиномами Лягерра, Эрмита и Чебышева. Как и все перечисленные нами полиномы, b_n ортогональны при умножении на соответствующий вес. У известных систем полиномов вес имеет вид довольно простой функции: у полиномов Лягерра e^x, у полиномов Эрмита e^{-x}, у полиномов Чебышева $1/\sqrt{1-x^2}$. В нашем случае вес имеет весьма сложный вид и определяется уравнением (100). Нормировочные коэффициенты a_n должны удовлетворять по общим законам теории преобразований соотношениям ортогональности:

$$\frac{\sqrt{2N}}{2\pi}\int\limits_0^\infty \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}a_n^*a_n=\begin{cases}1 & \text{при } n=m,\\ 0 & \text{при } n\neq m.\end{cases} \tag{124}$$

Вес, делающий ортогональным произведение b_nb_m, как нетрудно видеть из (100), с точностью до несущественных численных множителей равен

$$d\xi\,\xi^{3/2}e^{\xi}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\left[1+\left(\xi^{3/2}\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int\limits_{-1}^{+1}ds\,s^2e^{\xi s^2}\right)^2\right]^{-1}=d\xi\,\xi\frac{d}{d\xi}\operatorname{arctg}\left(\frac{4}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{\sqrt{\xi}}ds\,s^2e^{s^2}\right). \tag{125}$$

При больших ξ этот вес ведет себя, как $\sqrt{\xi}e^{-\xi}$, а при малых ξ — как $\xi^{3/2}$. Если в (124) подставить нормированные (с помощью соотношений (56) и (100)) значения a_n, то значения следующих определенных интегралов получаются целочисленными (n — положительные целые числа):

$$p_n=\frac{1}{\pi}\int\limits_0^\infty d\xi\,(2\xi)^n\frac{d}{d\xi}\operatorname{arctg}\left(\frac{4}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^{\sqrt{\xi}}ds\,s^2e^{s^2}\right). \tag{126}$$

Приведем значения этих интегралов для нескольких первых n:

$$p_1=1,\quad p_2=3,\quad p_3=13,\quad p_4=79,\quad p_5=641,\quad p_6=6\,579.$$

НАБЛЮДАЕМЫЕ ВЕЛИЧИНЫ В ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ. III*

В дополнение к двум предыдущим статьям показано, что введенная в них η-матрица определяет и дискретные стационарные состояния системы. Приведен полный расчет простой модели теории элементарных частиц. В этой модели существуют элементарные частицы без электрического заряда и момента импульса, которые взаимодействуя, могут не только рассеиваться друг на друге, но и образовывать составные частицы («атомные ядра»). Введенная нами η-матрица дает полное описание всех «наблюдаемых» свойств этих частиц. Во второй части работы выводится интегральное уравнение, которое служит обобщением обычного волнового уравнения, и проводится его квантование. Предлагая это обобщение, мы исходили из того, что в интегральных уравнениях дальнодействие включено с самого начала, и поэтому не возникают трудности с расходимостью, стоящие на пути к построению обычных теорий.

В предыдущих частях I и II этой серии статей [1)] была предпринята попытка выделить из квантовой теории волновых полей понятия, которые могли бы сохраниться и в будущей теории элементарных частиц, то есть как бы установить верхнюю границу изменений или обобщений, которые еще предстоит испытать существующей ныне теории. Настоящая работа дополняет предыдущие в двух направлениях. В ее первой части излагается описание процессов рассеяния и столкновения с помощью η-матрицы. Как будет показано, η-матрица позволяет определять не только частоту столкновений, но и положение стационарных состояний. Следовательно, в η-матрице содержатся все необходимые утверждения относительно наблюдаемых величин. Во второй части устанавливается своего рода нижняя граница изменений существующей теории. Вторая часть не связана непосредственно с содержанием предыдущих работ (I и II). Более того, подобно традиционной теории, она исходит из функции Гамильтона и волнового уравнения и показывает, что уже известные взаимодействия элементарных частиц приводят к необходимости значительного расширения обычной схемы волнового уравнения. В целом обе части настоящей работы отвечают на вопрос, в каких пределах, ***верхнем*** и ***нижнем***, следует изменить существующую теорию, чтобы она включала в себя будущую теорию с минимальными «припусками».

I

СЛЕДСТВИЯ ИЗ η-МАТРИЦЫ

а) η-матрица как аналитическая функция

В предыдущих работах было показано, что вся совокупность утверждений, которые можно извлечь относительно процессов соударения и рассеяния, содержится

---

* Die beobachtbaren Grossen in der Theorie der Elementarteilchen. III. — Zs. Phys., 1944, **123**, H. 1–2, 93–112. *Перевод Ю. А. Данилова.*

1) *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1943, **120**, 513 (Teil I); 1943, **120**, 673 (Teil II).

в эрмитовой матрице η, связанной с унитарной матрицей рассеяния S соотношением

$$S = e^{i\eta}. \tag{1}$$

Соответствие между η-матрицей и стационарными состояниями связанной системы в работах приведено не было. Поэтому, если для какого-то сорта элементарных частиц задана матрица взаимодействия η, задающая сечения для всех процессов столкновения, то в прежнем варианте приходилось косвенным образом устанавливать, могут ли две элементарные частицы или их большее число образовывать связанную систему, и определять энергии стационарных состояний последней.

Этот досадный пробел в современной теории удалось восполнить благодаря замечанию Крамерса[2], предложившего рассматривать матрицу $(\mathbf{k}'_i|S|\mathbf{k}''_i)$ как *аналитическую* функцию параметров состояния $\mathbf{k}'_i$, $\mathbf{k}''_i$ и извлекать сведения о стационарных состояниях из особенностей поведения этой функции на комплексной плоскости. Матрица S связывает падающие и уходящие волны, то есть указывает, какой уходящей волной следует дополнить данную падающую волну, чтобы получить решение волнового уравнения. Так как с помощью преобразования от плоских волн можно переходить к системам сферических или каких-нибудь других волн, то относительно матрицы S справедливо более общее утверждение: она определяет, какие дополнительные волны (на бесконечности) следует присоединить к данной системе волн, чтобы удовлетворить волновому уравнению. В качестве исходной можно выбирать системы волн, обладающие столь низкой полной энергией, что соответствующие импульсы частиц k_i будут мнимыми. Таким образом, можно задать волновые функции, экспоненциально убывающие по мере удаления к периферии (то есть на больших расстояниях от частиц). Для исходных функций найдется матрица S, которая дополняет их другими, например, экспоненциально возрастающими волновыми функциями так, что вся система функций в целом удовлетворяет волновому уравнению, так как, если S — аналитическая функция переменных $\mathbf{k}'_i$, $\mathbf{k}''_i$, то она должна устанавливать соответствие между исходными и дополнительными функциями и при мнимых k_i. Собственные стационарные состояния выделены тем, что у них отсутствуют экспоненциально убывающие функции, то есть нули матрицы S при мнимых k'_i указывают, где расположены стационарные состояния. Для собственных значений η-матрицы полученный результат означает, расположение стационарных состояний определяется полисами η-матрицы, лежащими на мнимой k-оси.

Утверждение о том, что матрица S должна быть аналитической функцией аргументов, требует пояснении. Если матрицу S вычислять в простых случаях нерелятивистской волновой теории, когда функция Гамильтона задана неаналитическим потенциалом (например, «потенциальным ящиком»), то она тем не менее оказывается аналитической. Следовательно, при заданной функции Гамильтона аналитический характер матрицы S может быть доказан при весьма общих предположениях. В настоящей работе мы не предполагаем существование функции Гамильтона и тем самым лишаем основы доказательство, поэтому аналитический характер матрицы S нам приходится просто *постулировать*.

Нужно сказать, что на область допустимых η-матриц мы накладываем более существенные ограничения, чем может показаться с первого взгляда. В частности, если η-матрица содержит внедиагональные элементы, которые обуславливают возникновение новых частиц, то простая η-матрица того типа, который рассмотрен в части II, в критических точках шкалы энергий (то есть в тех точках, где возможно рождение новых частиц) *не обладает* достаточной «гладкостью». Приведенные

[2] Я весьма признателен проф. Крамерсу за устное сообщение об этих важных идеях, опиравшихся на более ранние, не опубликованные исследования Крамерса и Воутхойзена, а также за различные другие замечания.

в части II соотношения приводят, например, к разрывам в сечениях рассеяния в критических точках, которые не существовали бы в теории, исходящей из функции Гамильтона. Следовательно, допустимое поведение η-матриц в критических точках целесообразно заимствовать из теорий с функцией Гамильтона и просто потребовать, чтобы η-матрица в критических точках была такой же гладкой, как и η-матрицы, вычисляемые по функциям Гамильтона. Чтобы ответить на вопрос, как выглядят допустимые η-матрицы, в каждом отдельном случае необходимо провести дополнительное исследование.

При принятых нами предположениях η-матрица полностью определяет поведение элементарных частиц (в той мере, в какой оно наблюдаемо в смысле предыдущих работ). Таким образом, любая заданная η-матрица в некотором смысле определяет модель теории элементарных частиц. Ниже мы подробно рассмотрим одну особенно простую модель такого рода. Эта модель отличается от теории реальных элементарных частиц следующими упрощениями: 1) в ней существует лишь один сорт элементарных частиц; 2) эти частицы не обладают спином и удовлетворяют статистике Бозе; 3) электрический заряд частиц равен нулю; 4) не существует процессов, в которых элементарные частицы могли бы аннигилировать или рождать новые, то есть число частиц всегда постоянно. Элементарные частицы взаимодействия между собой, могут образовывать составные частицы, включающие не менее двух элементарных частиц.

б) Модель теории элементарных частиц

Модель, удовлетворяющая всем перечисленным выше требованиям, как следует из соотношений (9) и (19) части II, задается выражением для η, имеющим вид

$$(\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2'\,|\eta|\,\mathbf{k}_1''\mathbf{k}_2'') = \frac{1}{\pi}\left(k_1^0k_2^{0\prime}k_1^{0\prime\prime}k_2^{0\prime\prime}\right)^{-1/2}\left[1-\frac{4\varkappa^2}{\left(k_1^{0\prime}+k_2^{0\prime}\right)^2-\left(\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'\right)^2}\right]^{-1/2}\times$$
$$\times\operatorname{arctg}\left(\alpha\sqrt{1-\frac{4\varkappa^2}{(k_1^{0\prime}+k_2^{0\prime})^2-\left(\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'\right)^2}}\right). \qquad (2)$$

(Обозначения те же, что и в части II.) Как и в соотношении (19) части II, очевидный множитель

$$\delta\left(\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'-\mathbf{k}_1''-\mathbf{k}_2''\right)\delta\left(k_1^{0\prime}+k_2^{0\prime}-k_1^{0\prime\prime}-k_2^{0\prime\prime}\right)$$

опущен. Ясно, что при очень малых значениях постоянной α взаимодействие (2) переходит в соотношение (9) части II. Из-за множителей δ в подкоренных выражениях вместо величин с одним штрихом могут стоять величины с двумя штрихами.

Как и в части II вычислим прежде всего собственные значения η-матрицы (2) и сечения рассеяния для случая, когда имеются только две элементарные частицы. Собственные значения η-матрицы можно получить непосредственно из формул (9)–(15) части II, заменив в них некоторые множители в соответствии с выражением (2). В обозначениях части II они равны, соответственно,

$$\eta_{0,0} = 2\operatorname{arctg}\left(\alpha\sqrt{1-\frac{4\varkappa^2}{(k_1^{0\prime}+k_2^{0\prime})^2-\left(\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'\right)^2}}\right) = 2\operatorname{arctg}(2v),$$
$$\eta_{n,m} = 0 \quad \text{при всех других значениях } n \text{ и } m. \qquad (3)$$

Как известно, из многозначности функции arctg не следует многозначность собственных значений матрицы S.

Из формул (16) и (17) части II получаем сечение взаимодействия в системе центра масс:

$$Q = \frac{4\pi}{k^2}\frac{(\alpha v)^2}{1+(\alpha v)^2} = \frac{4\pi\alpha^2}{k^{0 2}+\alpha^2 k^2}. \tag{4}$$

Если снова перейти в исходную систему координат, в которой, например, частица 2 покоится ($k_2' = 0$), то, как следует из (3) и (4),

$$Q = \frac{4\pi\alpha^2}{\varkappa^2 + (1+\alpha^2)\frac{\varkappa}{2}\left(k_1^{0\prime} - \varkappa\right)}. \tag{5}$$

Итак, при больших энергиях покоящихся частиц сечение взаимодействия убывает обратно пропорционально энергии.

Рассмотрим теперь стационарные состояния, в которых обе элементарные частицы связаны. Собственные значения η-матрицы задают разности фаз уходящей волны e^{ikr} относительно падающей волны e^{-ikr}. Если при достаточно малом значении $K^0 = k_1^{0\prime} + k_2^{0\prime}$ импульс k принимает мнимое значение, например, $k = -i|k|$, то «падающая» волна имеет вид $e^{-|k|r}$, а соответствующая ей «уходящая» волна — $e^{+|k|r}$. При $\eta = i\infty$ последняя обращается в нуль, и это дает условие существования стационарных состояний. Из (5) следует, что единственный полюс этого рода расположен в точке

$$\alpha v = i, \tag{6}$$

$$-i\alpha\left|\frac{k}{k^0}\right| = i. \tag{7}$$

Такой полюс существует лишь при *отрицательных* значениях α. В этом случае из (3) и (7) получаем

$$-\frac{1}{\alpha^2} = 1 - \frac{4\varkappa^2}{\left(k_1^{0\prime}+k_2^{0\prime}\right)^2 - \left(\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'\right)^2},$$

или, что то же,

$$\left(k_1^{0\prime}+k_2^{0\prime}\right)^2 - \left(\mathbf{k}_1'+\mathbf{k}_2'\right)^2 = K^{0 2} - \mathbf{K}^2 = 4\varkappa^2\frac{\alpha^2}{1+\alpha^2}. \tag{8}$$

Итак, энергия покоя «атомного ядра», состоящего из двух элементарных частиц, равна

$$\varkappa_2 = \varkappa\frac{-\alpha}{\sqrt{1+\alpha^2}}. \tag{9}$$

Эта энергия покоя, как и должно быть, меньше суммы масс двух элементарных частиц. При $|\alpha| \gg 1$ эффект масс мал ($\sim \varkappa/\alpha^2$), частицы связаны слабо.

Таким образом, в выбранной нами модели теории элементарных частиц образование «атомных ядер» аналогично связыванию протона и нейтрона в дейтрон. Как и в случае дейтрона, мы имеем лишь одно стационарное состояние связанной частицы. Любое возбуждение тотчас же приводит к распаду ядра на его две составные части.

Определив стационарные состояния связанной системы и сечение рассеяния, мы получаем все утверждения, какие только можно высказать о системе из двух элементарных частиц. На все остальные вопросы об этой системе эксперимент

23 Зак. 6

также не дает ответа. Новые вопросы возникают, если связанную систему из двух частиц возмущает третья элементарная частица. Например, можно поставить вопрос о возбуждении составного «ядра» налетающей третьей частицей, приводящем к его распаду или о дефекте массы ядра, состоящего из трех элементарных частиц и т. д. На все эти вопросы η-матрица (2) дает однозначный ответ. В качестве примера решения сложных проблем мы воспользуемся формулой (2) для вычисления дефекта массы одного из «ядер», состоящих из трех частиц[3].

В случае трех элементарных частиц между любыми двумя из них возникает взаимодействие вида (2). Приняв особое предположение, можно считать, что η-матрица аддитивна, то есть η-матрица системы получается из парных η-матриц без дополнительного члена: $\eta = \eta(12) + \eta(23) + \eta(31)$. Соответствующее допущение принимается (в большинстве случаев молчаливо) и относительно энергии взаимодействия U в функции Гамильтона:

$$U = U(12) + U(23) + U(31).$$

Его удается надлежащим образом обосновать, если переносчиками сил служат поля, описываемые линейным дифференциальным уравнением. В общем случае такое предположение следует рассматривать лишь как первое приближение. При рассмотрении ядерных сил мы сталкиваемся с необходимостью учитывать многотельные силы[4], которые лишь немногим меньше обычных взаимодействий. В том приближении, в котором взаимодействие допустимо рассматривать как малое возмущение, аддитивностью обычно обладает не только U, но и η. Однако при более точных вычислениях аддитивность U ***не обязательно*** влечет за собой аддитивность η. Итак, принципиально нельзя ожидать, что из аддитивности U будет следовать аддитивность η, но принципиально нельзя ожидать также, что энергия взаимодействия U будет аддитивна. Тем не менее, мы условимся считать, что в рассматриваемом нами примере η аддитивна. Это позволит нам максимально упростить вычисления. В теории, которую мы построим, либо U (насколько можно определить энергию взаимодействия), либо η аддитивны, а вид η-матрицы задается условиями другого рода.

Попытаемся, прежде всего, найти собственную функцию, симметричную относительно трех частиц и приводящую оператор взаимодействия к диагональному виду. Среди различных решений задаваемого η-матрицей уравнения Шредингера найдется такое, в котором падающая и уходящая волна будут сферическими волнами, симметричными относительно центра масс. В этом решении ни одна из трех элементарных частиц не обладает моментом импульса относительно центра масс. При значениях полной энергии $K^0 < 3\varkappa$ эта собственная функция в качестве «падающих» волн будет содержать, например, только экспоненциально затухающие волновые функции, а в качестве «уходящих» волн — соответственно, экспоненциально возрастающие функции. Полюса собственных значений η-матрицы дадут требуемые стационарные состояния. К этой группе принадлежит и самое глубокое стационарное состояние (возможно, что других стационарных состояний вообще нет).

Итак, собственная функция с полной энергией K^0 (предположим сначала, что $K^0 > 3\varkappa$) должна иметь вид

$$\psi(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \delta\left(k_1^0 + k_2^0 + k_3^0 - K^0\right)\delta\left(k_1 + k_2 + k_3\right) f\left(k_1^0, k_2^0, k_3^0\right)\left(k_1^0 k_2^0 k_3^0\right)^{-1/2}, \quad (10)$$

---

[3] *Примечание при корректуре.* Приводимое ниже решение проблемы трех тел по моему глубокому убеждению не безупречно. Несколько по внешним причинам значительные изменения в тексте невозможны, я изложу более точный вариант решения в одной из последующих работ.

[4] *Primakoff H., Holstein T.* Phys. Rev., 1939, **55**, 1218.

где f — симметричная функция трех аргументов. Область значений, допустимая для энергии каждой из трех частиц, задается неравенствами

$$\varkappa \leqslant k^0 \leqslant \frac{K^{0^2} - 3\varkappa^2}{2K^0}. \tag{11}$$

(Верхняя граница соответствует состоянию, в котором импульсы двух частиц равны по величине и противоположны по направлению импульсу третьей частицы.)

Для записи уравнения Шредингера необходимо предварительно вычислить результат действия на ψ оператора (2) для какой-нибудь пары частиц (например, для частиц 1, 2). Чтобы избежать излишнего усложнения формул, введем сокращенное обозначение:

$$\sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{(k_1^{0\prime} + k_2^{0\prime})^2 - (\mathbf{k}_1' + \mathbf{k}_2')^2}} = \sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{(K^0 - k_3^0)^2 - k_3^2}} = \sqrt{\ }. \tag{12}$$

Тогда

$$\int d\mathbf{k}_1' d\mathbf{k}_2' \psi(\mathbf{k}_1', \mathbf{k}_2', \mathbf{k}_3) (\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | \eta | \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) = \delta(k_1^0 + k_2^0 + k_3^0 - K^0) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) (k_1^0 k_2^0 k_3^0)^{-1/2} \times$$
$$\times \frac{1}{\pi\sqrt{\ }} \operatorname{arctg}(\alpha\sqrt{\ }) \int \frac{d\mathbf{k}_1' \delta(k_1^{0\prime} + k_2^{0\prime} - k_1^0 - k_2^0)}{k_1^{0\prime}(k_1^0 + k_2^0 - k_1^{0\prime})} f(k_1^{0\prime}, k_2^{0\prime}, k_3^{0\prime}). \tag{13}$$

Величину $k_2^{0\prime}$ в правой части можно заменить выражением

$$k_2^{0\prime} = \sqrt{\varkappa^2 + (\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_1')^2}, \tag{14}$$

а вместо $k_1^0 + k_2^0$ всюду, кроме первой δ-функции, подставить

$$k_1^0 + k_2^0 = K^0 - k_3^0. \tag{15}$$

Для интегрирования по $\mathbf{k}_1'$ удобно ввести $\cos(\mathbf{k}_1', \mathbf{k}_2') = \zeta$ и интегрировать сначала по ζ, а затем по соответствующему азимутальному углу. Проделав эти операции, получим

$$\int d\mathbf{k}_1' d\mathbf{k}_2' \psi(\mathbf{k}_1', \mathbf{k}_2', \mathbf{k}_3) (\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | \eta | \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) = \delta(k_1^0 + k_2^0 + k_3^0 - K^0) \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) (k_1^0 k_2^0 k_3^0)^{-1/2} \times$$
$$\times \frac{2 \operatorname{arctg}(\alpha\sqrt{\ })}{k_3\sqrt{\ }} \int dk_1^0 f(k_1^{0\prime}, K^0 - k_3^0 - k_1^{0\prime}, k_3^0). \tag{16}$$

Пределы интегрирования по $k_1^{0\prime}$ равны, соответственно,

$$k_1^{0\prime} = \frac{K^0 - k_3^0}{2} \pm \frac{k_3}{2}\sqrt{\ }. \tag{17}$$

Итак, действие оператора $(\mathbf{k}_1'\mathbf{k}_2' | \eta | \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2)$ на ψ приводит к выражению, которое (с точностью до трех первых тривиальных множителей) зависит только от k_3^0 и не зависит от кk_1^0 и k_2^0 в отдельности. Это позволяет представить f в виде

$$f(k_1^0, k_2^0, k_3^0) = g(k_1^0) + g(k_2^0) + g(k_3^0). \tag{18}$$

Следовательно, уравнение Шредингера, в котором оператор действует на три пары частиц 12, 13, 23 распадается на три тождественных уравнения, отличающихся в зависимости от пары переменными k_1^0, k_2^0, k_3^0. После некоторых элементарных преобразований каждое из этих уравнении приводится к виду

$$\eta g(k_3^0) = \left[g(k_3^0) + 2\int\limits_{-1/2}^{+1/2} dy\, g\left(\frac{K^0 - k_3^0}{2} + yk_3\sqrt{\ }\right)\right] 2\,\mathrm{arctg}\,(\alpha\sqrt{\ }), \tag{19}$$

где η в левой части означает собственное значение оператора η.

Найти точное решение интегрального уравнения (19) и определить соответствующее собственное значение мне не удалось. Но вполне хорошее приближение можно получить, заменив среднее от функции g в интервале $-1/2 \leqslant y \leqslant 1/2$ значением в точке $y = 0$. Это приближение тем лучше, чем меньше $k_3\sqrt{\ }$. Следовательно, оно дает вполне приемлемую точность и на концах интервала (11). В этом приближении уравнение имеет вид

$$\eta g(k_3^0) = \left[g(k_3^0) + 2g\left(\frac{K^0 - k_3^0}{2}\right)\right] 2\,\mathrm{arctg}\,(\alpha\sqrt{\ }). \tag{20}$$

Собственное значение мы тотчас же найдем, положив $k_3^0 = K^0/3$: при такой подстановке множители $g(K^0/3)$ в правой и левой частях сокращаются, и остается

$$\eta = 6\,\mathrm{arctg}\left(\alpha\sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{\frac{1}{3}K^{02} + \varkappa^2}}\right). \tag{21}$$

Так же, как и в случае двухчастичной системы, мы получаем полюс для η в точке

$$\alpha\sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{\frac{1}{3}K^{02} + \varkappa^2}} = i.$$

Возводя в квадрат обе части, получаем в рассматриваемом приближении уравнение для массы покоя «атомного ядра», образующегося из трех элементарных частиц:

$$\frac{1}{\alpha^2} = \frac{4\varkappa^2}{\frac{1}{3}K^{02} + \varkappa^2} - 1,$$

откуда

$$K^0 = 3\varkappa\sqrt{\frac{\alpha^2 - \frac{1}{3}}{\alpha^2 + 1}}.$$

Из уравнения (20) видно, что при $\eta \to \infty$ собственная функция отлична от нуля лишь в точке $k_3^0 = K^0/3$. Следовательно, в рассматриваемом приближении собственную функцию можно представить в виде

$$g(k_3^0) \sim \delta\left(k_3^0 - \frac{K^0}{3}\right).$$

Собственное значение (21) — не более, чем грубое приближение. Точное значение K^0 можно попытаться получить из уравнения (19), по крайней мере,

при $\eta \to \infty$. Для этого совершенно не обязательно находить точное решение уравнения (19). Действительно, преобразовав уравнение (19) к виду

$$g(k_3^0) = \frac{2\,\mathrm{arctg}\,(\alpha\sqrt{\ })}{\eta - 2\,\mathrm{arctg}\,(\alpha\sqrt{\ })} 2 \int\limits_{-1/2}^{+1/2} dy\, g\left(\frac{K^0 - k_3^0}{2} + yk_3\sqrt{\ }\right), \tag{22}$$

мы сразу получим, что при $\eta \to \infty$ функция может быть отлична от нуля лишь в непосредственной окрестности особой точки $\alpha\sqrt{\ } = i$. Спрашивается, можно ли указать второе условие, определяющее положение особой точки?

При $K^0 < 3\varkappa$ интервал

$$\varkappa \geqslant k_3^0 \geqslant \frac{K^{02} - 3\varkappa^2}{2K^0}$$

допустимых значений переменной k_3^0 распадается на три области, отличимые по характеру поведения функции (22). При $k_3^0 < (K^0 - \varkappa)/2$ (область I) переменная k_3^0 лежит ниже интервала, по которому производится интегрирование в правой части (22). При $\frac{K^0-\varkappa}{2} < k_3^0 < \frac{K^{02}+3\varkappa^2}{4K^0}$ (область II) переменная k_3^0 лежит внутри интервала интегрирования и при $k_3^0 > \frac{K^{02}+3\varkappa^2}{4K^0}$ (область III) — над интервалом интегрирования.

Априори ясно, что особая точка не может лежать в областях I и III, так как в противном случае уравнение (22) не имело бы смысла. Но особая точка не может находиться и в области II, так как в противном случае интеграл в правой части при значениях k_3^0 из окрестности особой точки не зависел бы от k_3^0. Следовательно, при $\eta \to \infty$ мы приходим к решению типа

$$g(k_3^0) = \mathrm{const}\, \frac{2\,\mathrm{arctg}\,(\alpha\sqrt{\ })}{\eta - 2\,\mathrm{arctg}\,(\alpha\sqrt{\ })}.$$

Значение константы невозможно выбрать так, чтобы выполнялось уравнение (22), в чем нетрудно убедиться прямой подстановкой. Значит, особая точка может находиться только на границе между областями I и II или между областями II и III. То, что и в том, и в другом случае действительно получаются решения уравнения (19) при $\eta \to \infty$, можно доказать, рассмотрев решения уравнения (22) при конечных η и выполнив предельный переход $\eta \to \infty$. Если же предположить, что собственные значения существуют, то для определения K^0 мы получим два уравнения, приводящих к двум различным собственным значениям в зависимости от того, где лежит полюс: на границе между областями I и II или II и III.

В первом случае

$$k_3^0 = \frac{K^0 - \varkappa}{2}, \qquad \alpha\sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{K^{02} - 2k_3^0 K^0 + \varkappa^2}} = i;$$

$$K^0 = \frac{3\alpha^2 - 1}{\alpha^2 + 1}\varkappa, \qquad g(k_3^0) \sim \delta\left(k_3^0 - \frac{\alpha^2 - 1}{\alpha^2 + 1}\varkappa\right).$$

Во втором случае (23)

$$k_3^0 = \frac{K^{02} + 3\varkappa^2}{4K^0}, \qquad \alpha\sqrt{1 - \frac{4\varkappa^2}{K^{02} - 2k_3^0 K^0 + \varkappa^2}} = i;$$

$$K^0 = \varkappa\sqrt{\frac{9\alpha^2 + 1}{\alpha^2 + 1}}, \qquad g(k_3^0) \sim \delta\left(k_3^0 - \frac{3\alpha^2 + 1}{\sqrt{(9\alpha^2 + 1)(\alpha^2 + 1)}}\right).$$

Итак, мы получили два дискретных стационарных состояния «атомного ядра», состоящего из трех частиц. Возможно, что у такого «атомного ядра» существуют и другие стационарные состояния, не принадлежащие к решениям типа (10). Масса покоя $\varkappa_3$ ядра из трех частиц в нормальном состоянии определяется выражением

$$\varkappa_3 = \frac{3\alpha^2 - 1}{\alpha^2 + 1}\varkappa. \tag{24}$$

Эта масса покоя, как и должно быть, несколько меньше суммы масс покоя трех частиц. При больших α дефект масс приближается к величине $4\varkappa/\alpha^2$, что примерно в 4 раза больше, чем в случае атомного ядра из двух частиц. И в этом случае все соотношения аналогичны тем, которые характерны для реальных атомных ядер: дефект массы для тритона примерно в 4 раза больше, чем для дейтрона.

Если помимо дефекта масс «атомного ядра» из трех частиц требуется такие вычислить частоту процессов соударения и рассеяния для одной частицы и «атомного ядра» из двух частиц, то кроме собственного значения (21) необходимо также определить все остальные собственные значения η-матрицы и затем снова перейти к матрице S. Вычисления при этом оказываются более громоздкими, и мы их не приводим. Приведенные нами примеры призваны были лишь показать, что η-матрица позволяет дать ответы на все вопросы, допускающие экспериментальную постановку. Следовательно, η-матрица вида (2) содержит удовлетворительную модель теории элементарных частиц, в которой на все экспериментально поставленные вопросы может быть дан ответ. Правда, предлагаемая нами модель представляет собой сильно упрощенный вариант полной теории: в действительности существует множество сортов элементарных частиц, которые рождаются, гибнут и превращаются друг в друга, частицы обладают целыми и полуцелыми спинами, имеют нулевой или отличный от нуля заряд и т. д. Действительность несравненно богаче нашей модели. Трудность, стоящая на пути создания теории, связана с необходимостью правильно описать все многообразие явлений, а отнюдь не в том, чтобы избежать расходимостей.

II

ОБОБЩЕНИЕ КАНОНИЧЕСКОЙ СХЕМЫ НА КВАНТОВАНИЕ ВОЛН

Вопросы, связанные с η-матрицей, лежат в стороне от содержания этой части нашей работы. В качестве исходного пункта выбрана обычная теория с функцией Гамильтона и волновым уравнением. Основная задача состоит в том, чтобы выяснить, как вообще может выглядеть функция Гамильтона и волновое уравнение будущей теории элементарных частиц. К решению этой задачи мы подходим, руководствуясь следующими соображениями. В существующей ныне теории (примером которой служит квантовая электродинамика) взаимодействие элементарных частиц вводится допущением о возможности рождения частиц одного сорта из частиц другого сорта (например, фотоны могут порождаться электронами), причем испускание или поглощение вторичных частиц косвенно вызывает взаимодействие первичных частиц. Так, взаимодействие фотонов современная теория описывает, как рождение и поглощение фотонами виртуальной пары электронов. Взаимодействие с электронами косвенно приводит к необходимости модификации уравнений Максвелла — замены их нелинейными интегродифференциальными уравнениями[5]. Обычные уравнения Максвелла сохраняют смысл лишь как предельный случай. Поскольку при этом приходится жертвовать и всей простотой уравнений Максвелла, то напрашивается предположение, что эти уравнения с самого начала были лишь предельным

[5] *Serber R.* Phys. Rev., 1935, **48**, 49; *Uehling E. A.* Phys. Rev., 1935, **48**, 55.

случаем, и что истинные исходные уравнения по сложности не уступали нелинейным интегродифференциальным уравнениям, пришедшим им на смену. Подобное утверждение, по-видимому, справедливо относительно всех волновых уравнений в теории элементарных частиц.

Предположение о том, что с самого начала теория должна исходить из сложных уравнений, подкрепляется следующими соображениями. Расходимости в современной теории формально обусловлены предположением о законах близкодействия. Например, зависимость характеристик распространения электронной волны в данной точке пространства-времени от напряженности электрического поля *в этой точке пространства-времени* на языке квантовой теории означает то же, что и предположение о δ-образном характере потенциала взаимодействия между электроном и фотоном. Но даже в нерелятивистской квантовой теории δ-образный потенциал взаимодействия всегда приводит к бесконечным собственным значениям. Следовательно, и в релятивистской квантовой теории волн предположение о «близкодействии» неизменно приводит к расходимости. Если же исходить из более сложных интегродифференциальных уравнений, к которым мы в конце концов все же приходим, то близкодействие с самого начала заменяется требованиями о лоренц-инвариантном пространственно-временном взаимодействии. Следовательно, усложненная теория ставит перед собой гораздо более широкие задачи, чем устранение расходимостей.

То же направление указывают и другие исследования, в которых бесконечной собственной энергии электронов удается избежать, по крайней мере, в рамках классической теории поля. Так, Борн и Инфельд[6] показали, что нелинейное обобщение уравнений Максвелла в смысле электродинамики Ми приводит к конечной собственной энергии электрона (рассматриваемого как особая точка поля). Штюккельберг[7] и Бопп[8] предложили обобщения уравнений Максвелла на случай линейных интегральных уравнений или дифференциальных уравнений высшего порядка, которые также приводят к конечной собственной энергии. Все эти исследования объединяет общая отличительная особенность: их авторы исходят из полевых уравнений более общих, чем уравнения Максвелла, и именно за счет общности им удается получить конечную собственную энергию электрона.

а) Обобщенные полевые уравнения

Если принять за образец уравнения электромагнитного поля, модифицированные теорией позитронов (см. Сербер[9], Юлинг[10], Гейзенберг, Эйлер[11]), то следует ожидать, что, во-первых, в будущей теории поля вместо дифференциальных операторов первого и второго порядка появятся интегральные операторы и, во-вторых, в нее будут включены нелинейные члены, описывающие взаимодействие элементарных частиц.

Начнем с простейшего случая — рассмотрим вещественную скалярную волновую функцию $\varphi(x)$ (x означает здесь четыре координаты x, y, z, ict). Тогда следует

[6] *Born M.* Proc. Roy., Soc. London, 1933, A143, 410; *Born M., Infeld L.* Proc. Roy. Soc., 1934; 144, 425; 1934, **147**, 522; 1935, **150**, 141.

[7] *Stückelberg E.C.G. von.* Nature, 1939, **144**, 118; Helv. Phys. Acta, 1941, **14**, 51. *Wentzel G.* Zs. Phys., 1934, **86**, 479, 635; *Dirac P.A.M.* Proc. Roy. Soc. London, 1938, **167**, 148.

[8] *Bopp F.* Ann. Phys., 1940, **38**, 345; 1943, **42**, 573.

[9] *Serber R.* Op. cit.

[10] *Uehling E.A.* Op. cit.

[11] *Heisenberg W., Euler H.* Zs. Phys., 1936, **98**, 714.

ожидать волновое уравнение вида

$$\int dx' A(x-x')\varphi(x') + \int dx'\, dx'' B(x-x', x-x'')\varphi(x')\varphi(x'') + \ldots = 0. \qquad (25)$$

Отбросив в (25) нелинейные члены, мы придем к уравнению, рассмотренному Штюккельбергом[12] и Боппом[13]. Выражения $A(x-x')$ и $B(x-x', x-x'')$ — релятивистски инвариантные функции пространственно-временных интервалов $x-x'$ и $x-x''$; dx' и dx'' — соответствующие четырехмерные дифференциалы.

Чтобы перейти от координатного пространства к импульсному, положим

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= \int e^{ik_\mu x_\mu}\varphi(k)\, dk, \\ A(x) &= \int e^{ik_\mu x_\mu} A(k)\, dk, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \end{aligned} \qquad (26)$$

Волновое уравнение (25) преобразуется при этом к виду

$$A(k)\varphi(k) + \int dk' B(k', k-k')\varphi(k', k-k') + \ldots = 0. \qquad (27)$$

Здесь dk и dk' означают четырехмерные дифференциалы импульсов k и k', а k — совокупность четырех координат k_1, k_2, k_3, k_4, A и B — релятивистски инвариантные функции от k и k'. Полагая $A(k) = \sum\limits_\nu k_\nu^2 + \varkappa^2$ и отбрасывая нелинейные члены, мы снова приходим к обычному волновому уравнению.

Итак, в дальнейшем мы будем исходить из следующего «волнового уравнения» в импульсном пространстве

$$\begin{aligned} A(k)\varphi(k) &+ \int dk' B(k, k')\varphi(k')\varphi(k-k') + \\ &+ \int dk'\, dk'' C(k, k', k'')\varphi(k')\varphi(k'')\varphi(k-k', k'') + \ldots = 0 \end{aligned} \qquad (28)$$

(обозначения лишь незначительно отличаются от обозначений, принятых в уравнении (27)).

Чтобы развить на основе уравнения (28) непротиворечивую теорию, необходимо ответить на 2 вопроса:

1) как выглядит соответствующий уравнению (28) тензор энергии-импульса?
2) как квантовать уравнение (28)?

Тензор энергии-импульса можно построить методом, предложенным Боппом[14]. Приведем только окончательный результат:

$$\begin{aligned} T_{\mu\nu}(k) &= \int dk' A(k')\varphi(k')\varphi(k-k')\frac{k'_\mu k'_\nu}{k'_\lambda k'_\lambda} + \\ &+ \int dk'\, dk'' B(k', k'')\varphi(k'')\varphi(k'-k'')\varphi(k-k')\left\{\frac{k''_\mu k''_\nu}{k''_\lambda k_\lambda} + \frac{(k'_\mu - k''_\mu)(k'_\nu - k''_\nu)}{(k'_\lambda - k''_\lambda)k_\lambda}\right\} + \ldots \end{aligned} \qquad (29)$$

---

[12] *Stückelberg E. C. G. von.* Op. cit.

[13] *Bopp F.* Op. cit.

[14] *Bopp F.* (В печати).

Действительно, как нетрудно проверить, из (28) следует, что

$$\sum_{\nu} T_{\mu\nu} k_\nu = 0, \tag{30}$$

то есть тензор $T_{\mu\nu}$ обладает нулевой дивергенцией. Условий симметричности и равенства нулю дивергенции не достаточно для того, чтобы однозначно задать $T_{\mu\nu}$. Следуя Боппу, для $T_{\mu\nu}$ можно привести и другие выражения, но все они отличаются от (29) на дивергенции. Значит, выражение для 4-вектора полной энергии-импульса однозначно определено. Таким образом, 4-вектор полной энергии-импульса однозначно определяется волновым уравнением.

Вычисление тензора $T_{\mu\nu}$ по формуле (29) в отдельных случаях сопряжено с трудностями, так как функция φ нередко содержит множители типа δ-функций, что приводит к необходимости выполнять сложные предельные переходы. Например, если положить $A(k) = \sum k_\nu^2 + \varkappa^2$, что соответствует обычному волновому уравнению, и считать $B = C = 0$, то решение уравнения (28) будет иметь вид

$$\varphi(k) = \delta\left(k_\nu^2 + \varkappa^2\right)\chi(k). \tag{31}$$

В этом случае тензор энергии-импульса при тех значениях k, при которых он отличен от нуля, получается равным $0 \cdot \infty$, и лишь подходящим предельным переходом его удается привести к обычному виду. Для вектора J_μ полной энергии-импульса имеем:

$$J_\mu = i \int T_{\mu 4}(x)\, dx_1\, dx_2\, dx_3 = i \int e^{ik_4 x_4} T_{\mu 4}(0, 0, 0, k_4). \tag{32}$$

Из соотношения (30) следует, что компонента тензора $T_{\mu 4}(0, 0, 0, k_4)$ может быть отлична от нуля только в точке $k_4 = 0$, поэтому

$$J_\mu = i \int_{-}^{+} T_{\mu 4}(0, 0, 0, k_4)\, dk_4, \tag{33}$$

где интеграл берется лишь в окрестности точки $k_4 = 0$.

До сих пор речь шла о «классической» теории поля (то есть функции $\varphi(x)$ были обычными «c-числами»), в которой не возникает никакой проблемы сходимости. Если определяющие полевое уравнение функции A, B, C и т.д. заданы, то волновые функции $\varphi(x)$ надлежит строить, исходя из уравнения (28).

б) Квантование теории

Возникает вопрос, каким образом можно проквантовать уравнение (28). Обычная схема канонических коммутационных соотношений здесь неприменима, так как не существует волновой функции, канонически сопряженной с $\varphi(x)$. Коммутатор

$$\left[\varphi(x), \varphi(x')\right] = \varphi(x)\varphi(x') - \varphi(x')\varphi(x) \tag{34}$$

в этом случае приходится вычислять довольно сложным образом из уравнения (28).

Тем не менее квантование однозначно следует из основных предположений квантовой теории. Действительно, начать можно с вычисления коммутатора волновой функции с вектором полной энергии и полного импульса, который должен быть равен

$$J_\mu \varphi(x) - \varphi(x) J_\mu = i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu}, \quad \text{или} \quad J_\mu \varphi(k) - \varphi(k) J_\mu = -K_\mu \varphi(k). \tag{35}$$

Этих коммутационных соотношений оказывается достаточно, чтобы однозначно задать всю математическую схему теории.

Проще всего в этом можно убедиться, рассмотрев одно вполне определенное представление оператора $\varphi(x)$, а именно то, в котором полная энергия и полный импульс приведены к диагональному виду. В этом представлении оператор $\varphi(x)$ (или $\varphi(k)$) заменяется матрицей $\left(J'\middle|\varphi(x)\middle|J''\right)$ (или, соответственно, $\left(J'\middle|\varphi(k)\middle|J''\right)$).

Коммутационные соотношения (35) переходят в

$$\left(J'_\mu - J''_\mu + k_\mu\right)\left(J'\middle|\varphi(k)\middle|J''\right) = 0, \quad \text{т.е.} \tag{36}$$

$$\begin{aligned} \left(J'\middle|\varphi(k)\middle|J''\right) &= \delta\left(J' - J'' + k\right)\left(J'\middle|\varphi\middle|J''\right), \\ \left(J'\middle|\varphi(x)\middle|J''\right) &= \left(J'\middle|\varphi\middle|J''\right)e^{(J'_\mu - J''_\mu)x_\mu}, \end{aligned} \tag{37}$$

где

$$\delta(k) = \delta(k_1)\delta(k_2)\delta(k_3)\delta(k_4). \tag{38}$$

Наоборот, если матрицы $\left(J'\middle|\varphi(x)\middle|J''\right)$, $\left(J'\middle|\varphi(k)\middle|J''\right)$ таковы, что выполняются соотношения (37), то выполняются и коммутационные соотношения (35). Подставляя (37) в волновое уравнение (28), получаем:

$$A(J' - J'')\left(J'\middle|\varphi\middle|J''\right) + \int dJ'''B(J'' - J', J''' - J')\left(J'\middle|\varphi\middle|J'''\right)\left(J'''\middle|\varphi\middle|J''\right) + \ldots = 0. \tag{39}$$

Тензор энергии-импульса принимает в этом представлении вид

$$\begin{aligned} \left(J''\middle|T_{\mu\nu}\middle|J''\right) &= \int dJ'''A\left(J''' - J'\right)\left(J'\middle|\varphi\middle|J'''\right)\left(J'''\middle|\varphi\middle|J''\right)\frac{\left(J'''_\mu - J'_\mu\right)\left(J'''_\nu - J'_\nu\right)}{\left(J'''_\lambda - J'_\lambda\right)\left(J''_\lambda - J'_\lambda\right)} + \\ &+ \int dJ'''\,dJ''''B\left(J'''' - J', J''' - J'\right)\left(J'\middle|\varphi\middle|J'''\right)\left(J'''\middle|\varphi\middle|J''''\right) \times \\ &\times \left(J''''\middle|\varphi\middle|J''\right)\left\{\frac{\left(J'''_\mu - J'_\mu\right)\left(J'''_\nu - J'_\nu\right)}{\left(J'''_\lambda - J'_\lambda\right)\left(J''_\lambda - J'_\lambda\right)} + \frac{\left(J''''_\mu - J'''_{mu}\right)\left(J''''_\nu - J'''_\nu\right)}{\left(J''''_\lambda - J'''_\lambda\right)\left(J''_\lambda - J'_\lambda\right)}\right\} + \ldots, \end{aligned} \tag{40}$$

а 4-вектор, как следует из (33) и (37), —

$$\left(J'\middle|J_\mu\middle|J''\right) = J_\mu\delta\left(J' - J''\right) = \delta(J'_1 - J''_1)\,\delta(J'_1 - J''_2)\,\delta(J'_2 - J''_3)\,i\left(J'\middle|T_{\mu4}\middle|J''\right). \tag{41}$$

Волновое уравнение (39) обеспечивает δ-функциональный характер правой части уравнения (41) по $J'_4 - J''_4$.

Итак, если удастся найти матрицу $\left(J'\middle|\varphi\middle|J''\right)$, удовлетворяющую уравнениям (39) и (41), то тем самым квантовотеоретическая задача, к которой свелось уравнение (28), будет решена.

Следовательно, коммутационные соотношения (35) вместе с волновым уравнением действительно образуют математическую схему теории. Остается лишь ответить на вопрос, возможно ли построить теорию элементарных частиц на основе (35)–(41).

в) Критика теории

Прежде всего, ясно, что уравнения (59) и (41) допускают решения не при любых функциях A, B, C, ... Например, при $A = k_\nu^2 + \varkappa^2$, $B = \text{const} \neq 0$, $C = \ldots = 0$ мы возвращаемся в координатном пространстве к волновому уравнению

$$\Box\varphi + \text{const}\cdot\varphi^2 = 0, \tag{42}$$

которое, если учесть коммутационные соотношения, не имеет сходящихся решений. Вообще, все известные волновые уравнения, если абстрагироваться от усложнений, вносимых спином и т. п., являются частными случаями уравнения общего типа (39), а все попытки решить последнее за исключением тех случаев, когда речь идет о частицах без взаимодействия, наталкиваются, как известно, на трудности, связанные с появлением расходимостей.

С другой стороны, вычеркнув члены с взаимодействием B, C и т. д., мы, разумеется, сумеем решить уравнения (39) и (41). Они вырождаются в линейные волновые уравнения того самого типа, который рассматривали Штюккельберг и Бопп:

$$A(k)\varphi(k) = 0. \tag{43}$$

Нули функции $A(k)$ определяют массы покоя элементарных частиц. При $A(k) = k_\nu^2 + \varkappa^2$ мы получаем обычное волновое уравнение, при $A(k) = k_\nu^2(k_\nu^2 + \varkappa^2)$ — волновое уравнение 4-го порядка, подробно исследованное Штюккельбергом и Боппом. Следовательно, такая теория заведомо возможна, но она не описывает взаимодействие элементарных частиц.

Итак, решающий вопрос состоит в том, существуют ли помимо $B = C = \ldots = 0$ функции A, B, при которых уравнения (39) и (41) допускают решение. Мне до сих пор не удалось найти такие функции. Если они не существуют, то это означает, что содержащегося в уравнениях (39) и (41) обобщения существующей теории недостаточно для построения теории элементарных частиц. Следовательно, от принятой ныне схемы необходимо отойти еще дальше и, отказавшись от всякого рода функций Гамильтона, попытаться непосредственно найти η-матрицу.

Но даже если бы существовали функции $A, B, \ldots$, при которых уравнения (39) и (41) допускали бы решения, то решение проблемы построения адекватной теории элементарных частиц от этого стало бы ненамного легче: чтобы найти правильные функции $A, B, \ldots$, необходимо развить соответствующие правильные представления, что по существу не уступает по трудности задаче построения правильной η-матрицы. По сравнению с η-матрицей уравнения (39) и (41) обладают, в лучшем случае, лишь тем преимуществом, что приводят к обобщению, которое легче согласовывалось бы с существующей теорией.

Тем не менее, в одном отношении математической схеме, основанной на использовании уравнений (39) и (41), присуще то неоспоримое преимущество, что она позволяет понять, каким образом в будущей теории можно будет определить массы элементарных частиц, для чего существующая теория не дает никаких подходов. Одного уравнения (39) недостаточно, чтобы установить, какие элементарные частицы возможны в соответствии с ним. Единственное, о чем разумно поставить вопрос, — это о дискретных собственных значениях J_μ уравнений (39) и (41). Под «дискретными собственными значениями» мы понимаем здесь следующее: при заданных J_1, J_2, J_3 существует определенное значение J_4, такое, что уравнения (39) и (41) имеют решение и при близких значениях J_4 не существует близкого решения $(J'|\varphi|J'')$, или, иначе говоря, матричный элемент $(J'|\varphi|J'')$ должен содержать множитель вида $\delta(J_\nu'^2 + \varkappa^2)$. Каждое дискретное собственное значение определяет массу покоя некоторой замкнутой системы и, следовательно, какую-то элементарную частицу. При этом принципиально невозможно различить, идет ли речь об «элементарной» или о «составной» частице. Разумеется, можно было бы ввести дополнительное соглашение относительно того, какую частицу следует считать элементарной и какую — составной, но, в принципе, между теми и другими частицами не существует различия. Итак, в будущей теории массы элементарных частиц будут определяться, как энергии стационарных состояний, и между элементарными и составными частицами не будет никакого различия.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Изложенные нами две математические схемы будущей теории элементарных частиц следует рассматривать как пределы, своего рода верхнюю и нижнюю границы того, что может быть унаследовано ею от существующей ныне теории. Эти схемы не исключают друг друга. Более того, вторая схема содержится в первой как частный случай. Первая схема показывает, что существует модель теории элементарных частиц, в которой выполнены все условия, налагаемые квантовой теорией и теорией относительности, не возникает никаких расходимостей и имеется ответ на каждый вопрос, допускающий постановку эксперимента. Вторая схема, если бы существовали решения соответствующих уравнений, позволила бы построить вариант обобщенной теории, являющийся естественным продолжением той теории, которой мы располагаем теперь. Тесная взаимосвязь между современной теорией и ее обобщением наиболее отчетливо проявилась бы в том, что в пределе при малых приращениях энергии-импульса функции $A, B, C, \ldots$ перешли бы в соответствующие функции современной теории. Однако пока не известно, существуют ли решения уравнений, положенных в основу второй схемы. В первой схеме (схеме η-матрицы) согласование с современной теорией достигается тем, что при малых приращениях энергии-импульса η-матрица переходит в η-матрицу современной теории. Однако поскольку последняя обычно имеет очень сложный вид, поэтому не следует ожидать, что в будущей теории η-матрица будет особенно простой. Необходимо поэтому задать простые законы иного рода и выводить из них η-матрицу как следствие. Массы элементарных частиц в будущей теории будут определяться, как энергии стационарных состояний. Между элементарными и составными частицами не будет никакого принципиального различия. В модели, рассмотренной в первой части настоящей работы, это обстоятельство явно не выражено, поскольку мы выбрали для простоты взаимодействие такого вида, при котором число частиц остается постоянным. В такой модели различие между элементарными и составными частицами весьма ощутимо.

О МАТЕМАТИЧЕСКИХ ОСНОВАХ ТЕОРИИ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ*

Когда две элементарные частицы сталкиваются при очень высокой энергии, то в результате столкновения может возникнуть частица любого другого типа, а иногда один акт столкновения порождает много различных частиц. Этот хорошо установленный экспериментальный факт, по-видимому, свидетельствует о том, что будущей теории элементарных частиц придется принять за исходное некое единое поле[1)], называемое просто «веществом» или «энергией», а не частицы какого-нибудь специального типа. Для этого единого поля можно указать некоторые коммутационные соотношения и полевые уравнения, приводящие к существованию непрерывных и дискретных собственных значений. Дискретные собственные значения описывают «частицы», которые в зависимости от принятого соглашения можно назвать элементарными или составными, не проводя строгого различия между определениями тех и других. Все частицы обладают конечными размерами — диаметром порядка 10^{-13}см или больше (иногда — гораздо больше). Попытки локализовать частицу в меньшей области приводят просто к тому, что возникают новые частицы.

I

а) Если намеченная нами в общих чертах картина правильна, то возникает вопрос: какую математическую основу следует подвести под нее? Предположение о том, что фундаментальной полевой величиной «вещества» должен быть спинор $\psi(x)$ представляется вполне правдоподобным, так как любые другие полевые величины, например, скаляры, векторы и т. д., можно составить из спиноров (x означает координаты x, y, z и $x_4 = ict$ четырехмерного пространства-времени). Состояние системы описывается вектором $\Psi(\sigma)$ в гильбертовом пространстве[2)], заданным на трехмерной пространственноподобной «поверхности» σ в x. Физически вектор Ψ задает вероятность того, что определенные наблюдаемые величины принимают на поверхности σ определенные значения. Волновая функция $\psi(x)$ связана с волновыми функциями элементарных частиц таким же сложным образом, каким в нерелятивистской квантовой теории волновая функция электронной «материи» была бы связана с волновой функцией, например, атома кислорода.

Если оператор $\psi(x)$ — известная функция пространства и времени в том смысле, что коммутационные соотношения заданы как вполне определенные

---

* On the mathematical frame of the theory of elementary particles. — Comm. Pure and Applied Mathematics, 1951, **4**, 1, 15–22. *Перевод Ю. А. Данилова.*

1) *Heisenberg W.* The present situation in the theory of elementary particles. Two lectures. Cambridge: Cambridge University Press, 1949; Zs. Naturforsch., 1950, 5a, 251, 367. Настоящая статья написана как обзор этих трех работ с комментариями по поводу последних достижений в этой области.

2) *Tomonaga S.* Progr. Theor. Phys., 1946, **1**, 27; *Feynman R. P.* Rev. Mod. Phys., 1948, **20**, 367; *Schwinger J.* Phys. Rev., 1948, **74**, 1439.

функции от координат x, то в обычной квантовой теории изменение системы со временем описывается уравнением вида

$$\frac{\delta\Psi(\sigma)}{\delta\sigma} = -iH(x)\Psi(\sigma), \tag{1}$$

где $H(x)$ — заданная релятивистски инвариантная функция от $\psi(x)$.

Если уравнение (1) выполняется, то, проинтегрировав его по σ, получим

$$\Psi(\sigma_2) = S_{\sigma_1}^{\sigma_2}\Psi(\sigma_1), \tag{2}$$

где

$$S_{\sigma_1}^{\sigma^2} = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx_1 \ldots \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx_n P\{H(x_1)\ldots H(x_n)\} \tag{3}$$

— унитарная матрица.

Символ P указывает на то, что произведение величин $H(x)$ следует брать при любом наборе переменных $x_1, \ldots, x_n$ в таком порядке, при котором более поздние точки x всегда располагались бы слева от более ранних. Это предписание релятивистски инвариантно, если $H(x)$ и $H(x')$ коммутируют при любом пространственно-временном интервале $x - x'$.

Уравнение вида (1) вряд ли будет существовать в будущей теории элементарных частиц, поскольку при очень малых расстояниях в пространстве и времени (меньше 10^{-13} см или 10^{-23} с) следует ожидать значительных отклонений от наших привычных физических представлений. Но если интервал между σ_1 и σ_2 выбран достаточно большим по сравнению с 10^{-23} с, то оператор $S_{\sigma_1}^{\sigma_2}$ заведомо описывает наблюдаемые величины. Следовательно, такой оператор должен существовать в будущей теории.

б) Если предположить, что спинор $\psi(x)$ удовлетворяет простому волновому уравнению типа уравнения Дирака

$$\left(\gamma_s \frac{\partial}{\partial x_s} + \varkappa\right)\psi(x) = 0$$

или в импульсном пространстве

$$(\gamma_s k_s - i\varkappa)\psi(\varkappa) = 0 \tag{4}$$

(γ_s — операторы Дирака, $\varkappa$ соответствует массе покоя «свободных частиц», описываемых спинором $\psi(x)$), то коммутационное соотношение принимает вид[3)]

$$\psi_\alpha(x)\psi_\beta^*(x') + \psi_\beta^*(x)\psi_\alpha(x) = -(2\pi)^{-1} \oint dk \frac{e^{ik_\nu(x-x')_\nu}}{k_\nu^2 + \varkappa^2}\left(ik_\varkappa\lambda_\varkappa^{\alpha\beta} - \varkappa\right), \tag{5}$$

где dk означает произведение $dk_1\, dk_2\, dk_3\, dk_4$, интегрирование по k_4 следует производить перед интегрированием по остальным k по замкнутому контуру, охватывающему две особые точки

$$k_4 = \pm i\left(\varkappa^2 + k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 + k_4^2\right)^{1/2}.$$

[3)] *Dyson F. J.* Phys. Rev., 1949, 75, 486; Phys. Rev., 1949, 75, 1736.

Правая часть коммутационного соотношения (5) обращается в нуль на любом пространственно-подобном интервале $x - x'$, в бесконечность — на световом конусе $(x - x')^2_\nu = 0$ и принимает конечные значения на времени-подобных векторах $x - x'$.

Особенность этой функции на световом конусе обычно делает невозможным применение матрицы (3): вычисление правой части приводило бы к интегралам от произведений таких функций, как правило, расходящимся.

Напрашивается вывод о необходимости начать с несингулярных коммутационных соотношений. Построить такие соотношения удается, если $\psi(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению высокого порядка[4)]

$$f(k_\mu\gamma_\mu)\psi(k) = 0. \tag{6}$$

В этом случае

$$\psi(x)\bar{\psi}(x') + \bar{\psi}(x')\psi(x) = -(2\pi)^{-4} \oint dk \, \frac{e^{ik_\nu(x-x')_\nu}}{f(\varkappa_\mu\gamma_\mu)}, \tag{7}$$

по-видимому, можно считать естественным обобщением соотношения (5). Оно регулярно даже на световом конусе, если $f(k_\mu\gamma_\mu)$ возрастает достаточно быстро (по крайней мере, как k^3) при больших значениях k.

Приняв предположение (7), мы сталкиваемся с трудностью: оператор $\bar{\psi}$ перестает быть эрмитово сопряженным с оператором ψ. Убедиться в этом можно следующим образом. Предположим для простоты, что $f(k_\mu\gamma_\mu)$ — многочлен по $k_\mu\gamma_\mu$ и уравнение

$$f(y) = 0 \tag{8}$$

имеет корни

$$y = ik_l, \quad l = 1, 2, \ldots . \tag{9}$$

Числа k_l можно рассматривать как массы покоя «свободных частиц» различных сортов. Тогда справедливо равенство

$$\frac{1}{f(k_\mu\gamma_\mu)} = \sum_l \frac{c_l}{\gamma_\nu k_\nu - ik_l} \tag{10}$$

с вещественными коэффициентами c_l. Как нетрудно проверить, одни коэффициенты c_l положительны, другие — отрицательны.

Так как каждое решение уравнения (6) принадлежит одному из k_l, то

$$\psi = \sum_{k_l>0} \alpha_l\psi_l + j\sum_{k_l<0} \beta_l\psi_l \tag{11}$$

и

$$\bar{\psi} = \sum_{k_l>0} \alpha_l^*\psi_l^* + j\sum_{k_l<0} \beta_l^*\psi_l^*, \tag{12}$$

где величины со звездочками эрмитово сопряжены с соответствующими величинами без звездочек. Подставляя (10), (11) и (12) в (7), получаем соотношение, которое в силу коммутационного соотношения (5) выполняется, если

$$\begin{aligned} |\alpha_l^*| &= c_l \quad \text{при} \quad c_l > 0, \\ |\beta_l^*| &= -c_l \quad \text{при} \quad c_l < 0, \end{aligned} \qquad j^2 = -1. \tag{13}$$

[4)] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1943, **120**, 513, 673.

Следовательно, $\bar{\psi}(x)$ не являются эрмитово сопряженными с операторами $\psi(x)$. Операторы $\bar{\psi}(x)$ и $\psi(x)$ были бы эрмитово сопряженными, если бы j в (12) мы могли бы заменить на $-j$, но это невозможно.

К соотношению (7) следует присоединить соотношения

$$\begin{aligned} \psi(x)\psi(x') + \psi(x')\psi(x) = 0, \\ \bar{\psi}(x)\bar{\psi}(x') + \bar{\psi}(x')\bar{\psi}(x) = 0. \end{aligned} \tag{14}$$

Эти свойства операторов $\psi(x)$ и $\bar{\psi}(x)$ позволяют заключить, что $H(x)$ как функция от $\psi(x)$ и $\bar{\psi}(x)$ в общем случае не будет эрмитовой матрицей.

Следовательно, матрица S, заданная соотношением (5), не унитарная, и соотношение (2) не может выполняться.

Эту трудность можно попытаться преодолеть следующим образом. Определим матрицу T соотношением аналогичным соотношению (3), но для неэрмитовой $H(x)$

$$T^{\cdots}_{\cdots} = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx_1 \ldots \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx_n P\big(H(x_1)\ldots H(x_n)\big). \tag{15}$$

Матрица T не унитарна. Для очень больших разностей $\sigma_2 - \sigma_1$ можно определить унитарную S-матрицу, задав ее соотношением

$$S = T\left(T^*T\right)^{-1/n}. \tag{16}$$

Это позволит предположить, что соотношение (2) выполняется, но только для разностей по времени между σ_2 и σ_1, которые очень велики по сравнению с 10^{-23} с.

Разложение матрицы S по степеням $H(x)$ имеет вид

$$S = \sum_n \frac{(-1)^n}{n!} S_n,$$

где

$$\begin{aligned} S_1 &= \frac{1}{2}\int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx\left[H(x) + H^*(x)\right], \\ S_2 &= \frac{1}{2}\int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx_1 \int_{\sigma_1}^{\sigma_2} dx_2\left[P\big(H(x_1)H(x_2)\big) + P\big(H^*(x_1)H^*(x_2)\big)\right] - \frac{1}{4}\left[\int_{\sigma_1}^{\sigma_2}\left(H - H^*\right)dx\right]. \end{aligned} \tag{17}$$

В совершенно общем виде можно показать, что S остается неизменной при замене H на H^*. Это свойство матрицы S записывается в виде равенства

$$S\ldots = S\ldots, \tag{18}$$

которое следует непосредственно из равенства $T = T\ldots$. Аналогичным образом доказывается, что

$$S = T\left(T^*T\right)^{-1/2} = \left(TT^*\right)^{-1/2}T. \tag{19}$$

II

а) Развитый нами математический формализм можно применить двумя способами. Во-первых, мы можем попытаться определить стационарные состояния системы, т. е. найти массы и угловые моменты свободных частиц. В этом случае разумно рассмотреть предел $\sigma_1 \to -\infty$ и найти те состояния системы, которые в шредингеровском представлении (операторы не зависят от времени) как функции времени могут изменяться только на фазовый множитель. Новое условие приводит к уравнению Шредингера обычного типа с единственным существенным различием: гамильтониан в этом случае содержит уже интегрирование по времени от $-\infty$ до рассматриваемого значения t. Это отклонение от обычного формализма вызывает изменения в обычных причинных связях между событиями. Кроме того, оно порождает небольшие технические проблемы: возникает необходимость указывать, каким образом следует производить интегрирование, поскольку при интегрировании периодической функции поведение интеграла при $\sigma \to -\infty$ становится неопределенным. Здесь необходимо ввести правило: при $\sigma_1 \to -\infty$ сходимость интервала обеспечивает очень медленно убывающий множитель. Это предположение эквивалентно допущению о том, что энергия взаимодействия включается адиабатически только при $\sigma_1 \to -\infty$.

Приняв такие меры предосторожности, мы получаем возможность вычислять вектор состояния дискретного стационарного состояния из уравнения Шредингера. Иначе говоря, функцию Шредингера вектора состояния можно выразить через переменные, выбранные для первоначального представления $\psi(x)$.

Если энергия взаимодействия H мала, то можно ожидать, что дискретные стационарные состояния будут находиться в окрестности «состояний невозмущенной свободной частицы», задаваемых массами покоя k_l из соотношения (9). Эти невозмущенные свободные частицы удобно называть «голыми частицами», чтобы отличать их от реальных стационарных состояний, которые можно назвать «реальными», или «одетыми», частицами. Ясно, что «голые частицы» — не более чем математические образы, помогающие записать уравнение. Они обычно отличаются от реальных частиц по массе и заряду. Если энергия взаимодействия H велика, то сколько-нибудь заметная связь между «голыми» и реальными частицами исчезает, и становится вполне очевидно, что «голые частицы» не имеют аналогов в реальности.

Выведенное нами следствие из уравнения Шредингера можно сформулировать в виде утверждения о том, что уравнение Шредингера позволяет найти функцию преобразования, осуществляющую переход от «голых частиц» к реальным.

Это преобразование позволяет также определить вектор состояния для системы, состоящей из нескольких элементарных частиц, которые движутся в пространстве на столь больших расстояниях друг от друга, что взаимодействием между ними можно пренебречь. При таких условиях операторы рождения различных частиц в различных точках пространства коммутируют, что позволяет просто составить произведение операторов рождения одной частицы из вакуума и подействовать им на вектор состояния вакуума, чтобы получить вектор состояния системы, состоящей из нескольких частиц.

Чтобы получить этот вектор состояния, можно также начать с вектора состояния системы из нескольких «голых» частиц, находящихся на больших расстояниях друг от друга, и подействовать на него оператором $S^{\sigma}_{-\infty}$, описанным выше.

б) Поведение системы при $t \to \infty$ можно описать, придавая σ в операторе $S^{\sigma}_{-\infty}$ все большие значения. Со временем частицы могут сталкиваться и взаимодействовать, но в конце концов они снова разлетятся, быть может, на много других частиц, и мы снова получим реальные частицы, которые движутся на больших расстояниях

друг от друга, удаляясь от нас и не взаимодействуя между собой. Следовательно, S-матрица описывает асимптотическое поведение уходящих волн и позволяет вычислять эффективные сечения интересующих нас процессов столкновения. Чтобы получить соответствующие элементы матрицы, необходимо проанализировать при очень больших положительных значениях σ вектор состояния, сравнив его с векторами состояния свободных (реальных, не голых) частиц.

III

а) В обычной квантовой теории оператор S обладает групповым свойством:

$$S = SS. \tag{20}$$

В предлагаемом нами формализме такое утверждение было бы неверно. Более того, наиболее характерное отличие теории S-матрицы от гамильтонова формализма состоит именно в том, что соотношение (20) не выполняется. Действительно, если бы соотношение (20) выполнялось, то интервал времени между σ_1 и σ_2 можно было бы подразделять на все меньшие и меньшие интервалы времени, и в конечном счете мы получили бы оператор, осуществляющий преобразование из σ в $\sigma + d\sigma$, который по существу был бы оператором Гамильтона.

Следовательно, предположение о том, что реальный оператор Гамильтона не существует, эквивалентно предположению о том, что не выполняется групповое свойство (20).

С другой стороны, выполнимость соотношения (20) служит условием, позволяющим задавать последовательность событий во времени, Следовательно, любое отклонение от (20) должно означать весьма сильное нарушение (общепринятых) понятий причинности и хронологического упорядочения. Важно выяснить поэтому возможный математический источник нарушений группового свойства (20). Для T-матрицы из (15) следует соотношение

$$T = TT. \tag{21}$$

Подставляя (16) и (21) в правую часть выражения для $S^{\dots}_{\dots}$, мы заключаем, что если бы оператор S обладал групповым свойством (20), то произведение матриц TT коммутировало бы с матрицей T и сопряженной матрицей. Следовательно, можно утверждать, что соотношение (20) приближенно выполняется для любого заданного вектора состояния, если для этого вектора состояния некоммутативность матриц TT и T пренебрежимо мала. Отсюда ясно, что отклонения матрицы T^*T от единичной, обусловленные неэрмитовой частью энергии взаимодействия H, приводят к нарушениям группового свойства (20). Если для вектора состояния переходы мнимой части энергии взаимодействия H несущественны (например, если выбранный вектор состояния соответствует малой энергии), то соотношение (20) будет приближенно выполняться. Однако для других векторов состояния из соотношения, которое получается при подстановке (16) и (21) в правую часть выражения для $S^{\dots}_{\dots}$, трудно усмотреть, в каких областях пространства-времени можно было бы ожидать отклонений от «причинности» и группового свойства (20).

б) Недавно Фирц[5] произвел тщательный анализ пространственно-временной структуры операторов коммутации, встречающихся при вычислении S-матрицы. Следуя более ранней работе Штюккельберта, Фирц сумел показать, что выражение S_ν (S_ν — в статье Дайсона, S_l — в настоящей работе), которое получается

[5] *Fierz M.* Helvetica Physica Acta.

из выражений типа $P\big(H(x_1)\ldots H(x_n)\big)$, соответствует обычным причинным связям событий, в то время как другие операторы коммутации, также встречающиеся при вычислении S-матрицы, соответствуют нарушениям причинных связей. Это означает, что последний член в правой части соотношения (17) приводит к нарушению причинности. Его можно интерпретировать как выражение, описывающее два последовательных (виртуальных) перехода, каждый из которых соответствует матричному элементу в мнимой части энергии взаимодействия H. В каждом из этих переходов энергия и импульс сохраняются, несмотря на виртуальный характер перехода. Однако последовательность событий может быть противоположна ожидаемой. Например, в конечном состоянии может оказаться, что частица в промежуточном состоянии была несколько раз сначала поглощена, а затем испущена, в то время как при обычной последовательности событий она должна была бы сначала быть испущенной и лишь затем поглощенной. Фирц с полным основанием подчеркнул, что такие отклонения обычно происходят не только в малых областях пространства-времени порядка 10^{-13} см (как неправильно утверждалось в разделе IIIа), но могут происходить и при гораздо больших расстояниях, так как соответствующие операторы коммутации, подобно волнам, распространяются по всему пространству.

Если мнимая часть энергии взаимодействия H вызывает только переходы, при которых от одной частицы другим передается большое количество энергии, то отклонения от обычной последовательности событий затрагивают только процессы, в которых энергия достаточно велика, чтобы достигать требуемой величины. По этой причине трудно сказать заранее, встречаются ли в действительности такие нарушения причинности. До сих пор наблюдать их заведомо никому не удавалось. Но обнаружить их весьма трудно, а о процессах с большой передачей энергии экспериментальные данные очень скудны.

С другой стороны, существующая ныне математическая схема представляет собой не более чем пример формализма, в котором сходимость достигается ценой частичного отказа от причинной связи событий при высоких энергиях. Не исключено, что впоследствии удастся разработать какую-нибудь другую математическую схему, в которой для достижения того же результата, причинной связью придется жертвовать лишь в областях порядка 10^{-13} см (или 10^{-23} с)[6].

в) В связи с этим представляется полезным сравнить существующую ныне схему с другими попытками избежать расходимостей за счет изменений в структуре пространства-времени на малых расстояниях. Две совершенно различные по духу попытки были предприняты Снайдером[7] (квантование пространства-времени) и Юкавой[8] (нелокальные поля). В обоих случаях до сих пор не удалось описать взаимодействие частиц в рамках единой математически непротиворечивой схемы. Но независимо от этих трудностей, которые, возможно, когда-нибудь удастся преодолеть, создается впечатление, что формализм типа предложенных Снайдером и Юкавой чрезмерно поступаются «локализацией» по сравнению с экспериментально наблюдаемой ситуацией. Необходимо помнить, что столкновение двух элементарных частиц при очень высоких энергиях можно весьма точно локализовать (по крайней мере в одном измерении), так как лоренцево сокращение позволяет сжать обе сталкивающиеся частицы в направлении движения до толщины гораздо

---

[6] *Примечание при корректуре.* Пример теории такого типа можно построить, если предположить, что в (13) все частицы могут под действием $H(x)$ претерпевать спонтанный распад и превращаться в несколько частиц. В этом случае длина временных интервалов, на протяжении которых нарушается причинность, ограничена временем жизни частиц.

[7] *Snyder H. S.* Phys. Rev., 1946, **71**, 38.

[8] *Yukawa H.* Phys. Rev., 1949, **77**, 219.

меньшей, чем 10^{-13} см. При столкновении нескольких частиц, летящих в различных направлениях, может оказаться возможной даже точная локализация в трехмерном пространстве. Именно это обстоятельство служит обоснованием для введения волновой функции, четыре координаты x которой являются c-числами. Ясно, что волновой пакет, имеющий по всем направлениям размеры меньше 10^{-13} см, был бы смесью многих различных частиц, поскольку столкновение элементарных частиц при очень больших энергиях приводит к рождению многих новых частиц. Таким образом, для получения непротиворечивой математической схемы вводить ограничения необходимо не на понятие локализации, а скорее на понятие причинности, модифицируя его так, чтобы действие распространялось из любой точки лишь на ее ближайшую окрестность. Однако нарушения причинности в этом смысле следует вводить лишь в малых областях порядка 10^{-13} см. Предлагаемая нами схема вводит такие отклонения даже в областях большего размера. Это не приводит к логическим противоречиям, но означает, что описание изменений распределения энергии в пространство-времени было бы ограничено более жесткими ограничениями, чем одно лишь требование обычной дополнительности между энергией и временем.

Часть III

ТЕОРИЯ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА

К ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА*

Молекулярные силы Вейсса сводятся к квантовомеханическим обменным силам; а именно, речь идет о тех обменных силах, которые в последнее время были успешно применены Гайтлером и Лондоном для объяснения гомеополярных валентных сил.

Введение

Ферромагнитные явления формально удовлетворительно объяснялись известной теорией Вейсса[1]. Эта теория базируется на гипотезе, что каждый атом в кристалле испытывает действие ориентирующей силы со стороны остальных атомов решетки, причем эта сила пропорциональна числу уже сориентированных атомов. Происхождение же этого атомарного поля было совершенно неизвестным, и на пути объяснения сил Вейсса на основе классической теории лежали следующие трудности. *Магнитные* силы взаимодействия между атомами всегда оказывались на несколько порядков величины слабее, чем атомарные поля, вычисляемые из экспериментов с ферромагнитными явлениями. Правда, *электрические* взаимодействия приводили к правильному порядку величин; однако прежде всего следовало бы ожидать, что электрическое взаимодействие двух атомов должно быть пропорционально квадрату косинуса угла их взаимной ориентации, в противоречии с предпосылками теории Вейсса. Другие трудности подробно обсуждались еще Ленцем[2], а Изингу[3] удалось показать, что и гипотеза об ориентирующих, достаточно больших силах между двумя соседними атомами цепочки недостаточна для получения ферромагнетизма.

Комплекс вопросов, связанных с ферромагнетизмом, вступил в новую стадию благодаря теории Уленбека—Гоудсмита о спине электрона. В частности, из известного множителя $g = 2$ в эффекте Эйнштейна—де Гааза (который и измерялся-то именно для ферромагнитных веществ) следует, что в ферромагнитном кристалле ориентируются только магнитные собственные моменты электронов, а вовсе не атомы. Вместе с тем опять исчезает возможность объяснить силы Вейсса как электрические взаимодействия, зависящие от относительной ориентации спина электронов, ибо мы знаем, что таких сил не существует. Далее, Паули[4] удалось показать, что в пренебрежении взаимодействием электронов в металле применение статистики Паули—Ферми—Дирака всегда дает парамагнетизм или диамагнетизм.

§ 1
Модельные основы теории

Основная идея предлагаемой здесь теории формулируется следующим образом: ситуация с электрическими данными по ферромагнетизму очень напоминает то

* Zur Theorie des Ferromagnetismus. — Zs. Phys., 1928, **49**, 619–636. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Weiss P.* J. de Phys. (4), 1907, **6**, 661; Zs. Phys., 1908, **9**, 358.

[2] *Lenz W.* Zs. Phys., 1920, **21**, 613.

[3] *Ising E.* Zs. Phys., 1925, **31**, 253.

[4] *Pauli W.* Zs. Phys., 1927, **41**, 81.

положение вещей, которое когда-то раньше мы имели со спектром атома гелия. Тогда из термов атома гелия, казалось бы, следовало, что между ориентациями спинов двух электронов существует сильное взаимодействие, приводящее к расщеплению термов на синглетную и триплетную системы. В то время эта трудность была устранена доказательством того, что кажущееся сильное взаимодействие порождается косвенно резонансными или обменными процессами. Поэтому напрашивается мысль *привлечь эти обменные процессы также и для объяснения ферромагнитных явлений*. Мы попытаемся показать, что для того, чтобы производить такие действия, как и постулированное Вейссом молекулярное поле, достаточными оказываются кулоновские взаимодействия вместе с принципом Паули. Математические методы рассмотрения такой сложной проблемы были развиты только в последнее время в важных работах Вигнера[5)], Хунда[6)], Гайтлера и Лондона[7)].

Прежде чем перейти к собственно к вычислениям, я хотел бы привести краткий обзор приближенных методов, которые могут быть применены при рассмотрении движения электронов в металлах.

Метод I. Согласно Паули[8)] и Зоммерфельду[9)], электроны предполагаются в первом приближении совершенно свободными. Во втором приближении добавляются в качестве возмущения взаимодействия с центрами решетки (Хоустон[10)]). Взаимодействием электронов между собой полностью пренебрегается.

Метод II. В качестве первого приближения рассматривается движение электрона в периодическом (по трем направлениям) силовом поле (которое не обязано быть слабым). В следующем приближении учитываются возмущения, возникающие при отклонениях от периодичности решетки. Рассмотрение взаимодействия электронов между собой встречается здесь с такими же трудностями, как в методе I.

Метод III. В первом приближении предполагается, что постоянная решетки очень велика и что каждый электрон принадлежит своему атому. В следующем приближении учитывается впервые рассмотренный Гайтлером и Лондоном[11)] обмен электронами, движущимися в невозмущенной системе в *различных* местах с *одинаковой* энергией. Состояния, в которых в одном атоме имеется больше электронов, чем в невозмущенной системе, в этом приближении *не учитываются*.

Различие между этими тремя методами станет яснее, если мы рассмотрим его на другом примере — на молекуле водорода, подробно исследованной Гайтлером и Лондоном[12)]. В методе I электроны сначала считались бы снова свободными, что для этого случая не было бы, конечно, хорошим исходным приближением для расчета молекулы. В методе II мы бы исходили из решений двухцентровой задачи (см. Хунд[13)]). Терм, для которого в предельном случае бесконечно удаленных друг от друга ядер электрон 1 обращается по $1S$-орбите вокруг ядра a, электрон 2 — по $1S$-орбите вокруг ядра b, расщепился бы на четыре терма (от 1 до 4); например по схеме:

---

5) *Wigner E.* Zs. Phys., 1927, **40**, 883; 43, 624.

6) *Hund F.* Zs. Phys., 1927, **43**, 788.

7) *Heitler W., London F.* Zs. Phys. 1927, **44**, 455; *Heitler W.* Zs. Phys., 1927, **46**, 47; Zs. Phys., 1928, **47**, 835; *London F.* Zs. Phys., 1928, **455**, 455.

8) *Pauli W.* Op. cit.

9) *Sommerfeld A.* Zs. Phys., 1928, **47**, 1; см. также *Houston W. V.* Zs. Phys., 1928, **47**, 33; *Eckart C.* Zs. Phys., 1928, **47**, 38.

10) *Houston W. V.* Zs. Phys., 1928, **48**, 449.

11) Ibid.

12) *Heitler W., London F.* Op. cit.

13) *Hund F.* Zs. Phys., 1927, **40**, 742.

	Ядро *a*	Ядро *b*
1	1	2
2	2	1
3	1,2	—
4	—	1,2

Взаимодействие двух электронов учитывалось бы только в высших приближениях. Метод III полностью совпадает с методом, использованным Гайтлером и Лондоном. В невозмущенной системе имеются только термы 1 и 2. Относительно термов 3 и 4 предполагается, что они приводят к значениям энергии, расположенным значительно выше. Множество термов невозмущенной системы для метода III, таким образом, оказывается более узким, чем для метода I или II.

Вероятно, заранее у нас нет оснований для того, чтобы отдавать предпочтение какому-нибудь одному из трех приближенных методов. Метод I будет скорее всего применим для металлов с очень *большой* проводимостью, метод III — для металлов с *малой* проводимостью. Метод II занимает промежуточное положение между этими двумя предельными случаями.

В следующих вычислениях я буду применять метод III, потому что только он позволяет провести количественное рассмотрение взаимодействия электронов.

§2

Распределение термов по величине

Следующие вычисления представляют собой простое обобщение исследований Гайтлера—Лондона[14] на случай 2 взаимодействующих электронов (число электронов предполагается четным по чисто формальным причинам). Таким образом, в невозмущенной системе $2n$ электронов находятся в $2n$ *различных* (если не энергетически, то хотя бы пространственно различных) квантовых ячейках.

Относительно квантовых чисел электронов в атоме мы будем сначала предполагать, что они одинаковы для всех атомов. Другие стационарные состояния невозмущенной системы мы учитывать не будем, предполагая, что они привели бы к слишком высоким значениям энергии.

Затем мы должны определить значения энергии стационарных состояний всей системы, возникающие в описанном выше состоянии, когда в качестве возмущения рассматривается кулоновское взаимодействие заряда одного из атомов с зарядом какого-нибудь другого атома. Вследствие большой сложности вычислений нам удалось провести расчеты только в первом порядке теории возмущений. Будет ли в действительности достаточным это первое приближение для случаев, реализующихся в природе, — этот вопрос нам пришлось оставить пока в стороне. Собственные функции невозмущенной системы мы брали в виде произведений шредингеровских собственных функций атома водорода, или лучше — произведений собственных функций, отвечающих рассматриваемому атомному остатку, совершенно так же, как в цитированной работе Гайтлера и Лондона; повторять здесь подробно эти выкладки мы, пожалуй, не будем. Эти собственные функции, правда, не ортогональны, но отличие от обычного рассмотрения, обусловленное этим обстоятельством, выражается лишь в членах второго порядка, и поэтому мы можем и здесь последовательно применять методы, обычные для ортогональных собственных функций. Вследствие взаимного возмущения электроны одного из атомов могут вступать в обмен с электронами какого-нибудь другого атома. Пока мы не рассматриваем члены второго порядка по теории возмущений, при этом будут встречаться только

[14] *Heitler W., London F.* Op. cit.

простые транспозиции между двумя соседними атомами. В простейшем случае, когда в невозмущенной системе каждый атом обладает *одним* валентным электроном, «обменные члены» энергии возмущения сводятся к выражениям, указанным Гайтлером и Лондоном:

$$J_{(kl)} = \frac{1}{2}\int \psi_k^{\varkappa}\psi_k^{\lambda}\psi_l^{\varkappa}\psi_l^{\lambda}\left(\frac{2e^2}{r_{kl}} + \frac{2e^2}{r_{\varkappa\lambda}} - \frac{e^2}{r_{\varkappa k}} - \frac{e^2}{r_{\varkappa l}} - \frac{e^2}{r_{\lambda k}} - \frac{e^2}{r_{\lambda l}}\right)d\tau_k\, d\tau_l. \qquad (1)$$

Здесь буквы k и l обозначают номера двух электронов, $\varkappa$ и λ — номера тех атомных остатков, которым k и l принадлежали в невозмущенной системе. В качестве второй важной константы в расчеты по теории возмущений входит постоянная чисто «статического» взаимодействия:

$$J_E = \int d\tau_1\, d\tau_2 \ldots d\tau_{2n} (\psi_1^1)^2 (\psi_2^2)^2 \ldots (\psi_{2n}^{2n})^2 \left\{\sum_{\substack{k,l\\k>l}} \frac{e^2}{r_{kl}} + \sum_{\substack{\varkappa,\lambda\\ \varkappa>\lambda}} \frac{e^2}{r_{\varkappa\lambda}} - \sum_{\substack{k,\lambda\\ k\neq\lambda}} \frac{e^2}{r_{k\lambda}}\right\}. \qquad (2)$$

Магнитными взаимодействиями ввиду их малости мы можем полностью пренебрегать. Несмотря на это, *вследствие процессов обмена* спиновые моменты всех электронов выстраиваются частью параллельно, а частью антипараллельно. Если учесть еще основополагающую гипотезу о *принципе Паули*, требующем, чтобы собственные функции всей системы были антисимметричными по отношению ко всем электронам, то каждому значению терма возмущенной системы будет соответствовать совершенно определенный полный магнитный момент, определяемый моментом импульса системы $s(h/2\pi)$. Всего в возмущенной системе существует $(2n)!$ термов (если отвлечься от принципа Паули и спина). *Статическое рассмотрение ферромагнетизма станет возможным, когда будут вычислены все значения энергии, принадлежащие заданному значению* s. Задача эта в такой форме, конечно, неразрешима, ибо $2n$ — очень большое число. Мы можем лишь надеяться на то, что сможем получить общее представление о распределении собственных значений при заданном s. В дальнейшем мы вычислим *число* термов, энергетический центр тяжести, т. е. *среднее значение* энергии при заданном s и *средний квадрат флуктуаций* около этого среднего значения. Затем мы сделаем безусловно несколько произвольное предположение, что в первом приближении значения энергии распределены около среднего значения по кривой ошибок Гаусса, причем ширина этой кривой может быть вычислена из среднеквадратичной флюктуации.

Согласно исследованиям Вигнера, Хунда и Гайтлера (l. c.) в случае гипотезы о принципе Паули каждому значению полного спинового момента s принадлежит *одна* система термов («σ»), характеризуемая определенным разбиением $2n$ на слагаемые

$$2n = \underbrace{2+2+\ldots+2}_{(n-s)\ \text{раз}} + \underbrace{1+\ldots+1}_{2s\ \text{раз}}. \qquad (3)$$

Разбиением «обратной» системы тогда называется просто

$$2n = (n-s) + (n+s). \qquad (4)$$

Для среднего значения энергии в системе σ, т. е. «энергетического центра тяжести», Гайтлер[15] получил формулу

$$E_\sigma = \frac{1}{f_\sigma}\sum_P \chi_\sigma^P J_P. \qquad (5)$$

[15] *Heitler W.* Zs. Phys., 1927, **46**, 47.

Здесь χ_σ^P означает характер группы, принадлежащий перестановке P, $f_\sigma = \chi_\sigma^E$ — *число* термов системы. Энергия невозмущенного состояния в этой формуле опущена как несущественная аддитивная постоянная. Теперь мы вычислим средний квадрат флюктуаций энергии $\overline{\Delta E^2}$ около значения E_σ. Значения энергии получаются в качестве корней уравнения степени f_σ, получаемого при приравнивании нулю определителя

$$\begin{vmatrix} \sum\limits_P b_{11}^P J_P - x & \sum\limits_P b_{12}^P J_P & \dots & \sum\limits_P b_{1f}^P J_P \\ \sum\limits_P b_{21}^P J_P & \sum\limits_P b_{22}^P J_P - x & \dots & \dots \\ \vdots & & & \vdots \\ \sum\limits_P b_{f1}^P J_P & & & \sum\limits_P b_{ff}^P J_P - x \end{vmatrix} = 0. \tag{6}$$

Сумма корней этого уравнения $\sum x_n$ дается коэффициентом при x^{f-1}, значит, $\sum\limits_{i,P} b_{ii}^P J_P = \sum\limits_P \chi_\sigma^P J_P$, откуда и получается уравнение (5). Сумма $\sum\limits_{n>m} x_n x_m$ дается коэффициентом при x^{f-2} в уравнении (6), и поэтому мы имеем

$$\begin{aligned} \sum_{n>m} x_n x_m &= \sum_{i>k} \sum_{P,P'} b_{ii}^P b_{kk}^{P'} J_P J_{P'} - \sum_{i>k} \sum_{P,P'} b_{ik}^P b_{ki}^{P'} J_P J_{P'} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i,k} \sum_{P,P'} b_{ii}^P b_{kk}^{P'} J_P J_{P'} - \sum_{i,k} \sum_{P,P'} b_{ik}^P b_{ki}^{P'} J_P J_{P'} \right). \end{aligned} \tag{7}$$

В последнем выражении суммирование производится независимо по всем значениям i, k. Но $\sum\limits_k b_{ik}^P b_{ki}^{P'}$ означает i-й диагональный элемент матрицы произведения $b^P b^{P'}$. Поскольку матрицы b образуют представление группы, мы имеем

$$b^P b^{P'} = b^{P \cdot P'}.$$

Учитывая еще, что $\chi^P = \sum\limits_i b_{ii}^P$, мы получаем

$$\sum_{n>m} x_n x_m = \frac{1}{2} \sum_{P,P'} (\chi^P \chi^{P'} - \chi^{P \cdot P'}) J_P J_{P'}. \tag{8}$$

Подставляя $x_n = E_\sigma + \Delta E_n$ (индекс σ принадлежит здесь, собственно говоря, также и переменным x_n, ΔE_n; мы опускаем его для упрощения записи), мы получаем

$$\begin{gathered} \sum_{n>m} x_n x_m = \sum_{n>m} (E_\sigma + \Delta E_n)(E_\sigma + \Delta E_m) = \frac{f_\sigma(f_\sigma - 1)}{2} E_\sigma^2 + \sum_{n>m} \Delta E_n \Delta E_m; \\ (n, m = 1, \dots, f_\sigma). \end{gathered} \tag{9}$$

Вследствие равенства $\sum \Delta E_n = 0$ имеем

$$\sum_{n=1}^{f_\sigma} \Delta E_n^2 = -2 \sum_{n>m} \Delta E_n \Delta E_m. \tag{10}$$

Наконец, из формул (5), (8), (9), (10) и уравнения $f_\sigma = \chi_\sigma^E$ получаем

$$\sum_{n=1}^{f_\sigma} \Delta E_n^2 = \frac{1}{f_\sigma} \sum_{P,P'} \left(\chi_\sigma^E \chi_\sigma^{P\cdot P'} - \chi_\sigma^P \chi_\sigma^{P'}\right) J_P J_{P'} \tag{11}$$

и

$$\overline{\Delta E_\sigma^2} = \frac{1}{f_\sigma^2} \sum_{P,P'} \left(\chi_\sigma^E \chi_\sigma^{P\cdot P'} - \chi_\sigma^P \chi_\sigma^{P'}\right) J_P J_{P'}. \tag{12}$$

Для того чтобы иметь возможность применять эти формулы, мы должны еще вычислить характеры групп для перестановок различных классов. Поскольку все J_P обращаются в нуль, за исключением случаев, когда $P = E$ и P принадлежит классу (12) — транспозициям, — среди $\chi_\sigma^{P\cdot P'}$ следует рассматривать только следующие типы

$$\chi_\sigma^E, \quad \chi_\sigma^{(12)}, \quad \chi_\sigma^{(123)}, \quad \chi_\sigma^{(12)(34)}.$$

Эти характеры групп можно вычислить по методу Шура, описанному Гайтлером[16]. Прежде всего, для обратных систем термов получаем[17]:

$$\begin{aligned}
\chi_{n-s,n+s}^E &= \frac{(2n)!(2s+1)}{(n-s)!(n+s+1)!},\\
\chi_{n-s,n+s}^{(12)} &= \frac{(2n-2)!2(2s+1)}{(m-s)!(n+s+1)!}\left(s^2+s+n^2-2n\right),\\
\chi_{n-s,n+s}^{(123)} &= \frac{(2n-3)!2(n-1)}{(n-s)!(n+s+1)!}\left\{6s^3+9s^2+s\left(2n^2-10n+3\right)+n(n-5)\right\},\\
\chi_{n-s,n+s}^{(12)(34)} &= \frac{4(2n-4)!}{(n-s)!(n+s+1)!}\left\{2s^5+5s^4+4s^2\left(n^2-5n+4\right)+s^2\left(6n^2-30n+19\right)+\right.\\
&\quad \left.+2s\left(n^4-6n^3+15n^2-14n+3\right)+n^4-6n^3+14n^2-9n\right\}.
\end{aligned} \tag{13}$$

Характеры действительно существующих систем термов отличаются от вышеперечисленных здесь характеров обратных систем только знаком. А именно, характер обратной системы равен или равен с противоположным знаком характеру самой системы, если перестановка P получается из четного или нечетного числа транспозиций.

До сих пор наши результаты были справедливыми для совершенно общего случая, так как мы не пользовались предположениями, сделанными нами о кристаллической решетке или о строении атома.

Теперь, чтобы перейти к вычислениям, мы должны сделать более конкретные предположения. Прежде всего, из формулы (1) и из расчетов Гайтлера и Лондона следует, что интеграл $J_{(12)}$ с увеличением расстояния убывает экспоненциально. Поэтому атом в решетке будет вступать в обмен главным образом со своими «соседями»; напротив, обменом с каким-нибудь атомом, расположенным дальше «соседних атомов», следует пренебрегать. Число «соседей» атома, например, в молекулярной решетке двухатомных молекул равно 1, в линейной цепочке — 2, в квадратичной

[16] *Heitler W.* Zs. Phys., 1928, **47**, 835.

[17] Значения f_σ и $\chi_\sigma^{(12)}$, указанные Гайтлером (*Heitler W.* Zs. Phys., 1928, **47**, 835, уравнение (32)), искажены из-за опечатки.

плоской решетке — 4, в простой кубической решетке — 6, в кубической объемноцентрализованной решетке — 8, в кубической гранецентрированной решетке — 12.

Далее мы сделаем допущение, что все неисчезающие обменные члены J_P должны быть *равными* между собой (мы будем обозначать их общую величину через J_0). Так должно быть, если атомные остатки будут немагнитными, т. е. центрально симметричными. Итак, теперь мы вычислим E_σ и $\overline{\Delta E_\sigma^2}$ для решетки, в которой каждый атом имеет z соседей. При этом мы будем учитывать только самые высшие степени n и s, а члены с низшими степенями опустим; это значит, что мы не будем рассматривать эффекты на граничных поверхностях кристалла.

Число транспозиций, приводящих к значениям J_0 (т. е. число пар атомов с наименьшим расстоянием), равно $z \cdot 2n/2 = zn$. Поэтому из формул (5) и (13) следует

$$E_\sigma = -z\frac{s^2+n^2}{2n}J_0 + J_E. \tag{14}$$

Для вычисления $\overline{\Delta E_\sigma^2}$ нам необходимо прежде всего найти значение выражения

$$A_{P,P'} = \frac{1}{f_\sigma^2}\left(\chi^E\chi^{P\cdot P'} - \chi^P\chi^{P'}\right) \tag{15}$$

для различных возможных комбинаций P и P'. Получаем (с точностью до низших степеней n и s):

1. $P = P'$:

$$A_{(12)(12)} = \frac{(n^2-s^2)(3n^2+s^2)}{4n^4},$$

2. P и P' *имеют один* общий элемент:

$$A_{(12)(13)} = \frac{(n^2-s^2)s^2}{4n^4}, \tag{16}$$

3. P и P' *не имеют* общего элемента:

$$A_{(12)(34)} = -\frac{(n^2-s^2)s^2}{2n^5}.$$

Если атом имеет z соседей, то тип 1 встречается zn раз, тип 2 — $z(z-1)n$ раз, тип 3 — $\frac{z^2n^2}{2}$ раз.

Наконец, для $\overline{\Delta E_\sigma^2}$ в соответствии с уравнением (12) получаем

$$\overline{\Delta E_\sigma^2} = J_0^2\left(znA_{(12)(12)} + 2z(z-1)nA_{(12)(13)} + 2A\right)$$

и

$$\overline{\Delta E_\sigma^2} = J_0^2 z\frac{(n^2-s^2)(3n^2-s^2)}{4n^3}. \tag{17}$$

Таким образом, среднее отклонение энергии от среднего значения энергии (14) по порядку величины составляет $\Delta E_\sigma \sim J_0\sqrt{n}$. В предшествующих формулах $-\sigma$ означает всегда систему термов, принадлежащих разбиению (3) и потому полному спиновому моменту s.

§ 3
Статистика: связь с формулами Вейсса

Следующие выкладки будут основываться на упомянутом уже выше, хотя и несколько произвольном допущении о том, что распределение значений энергии около ее среднего значения приблизительно имеет вид гауссовой кривой ошибок. Поскольку общее число термов, принадлежащих спиновому моменту s, равно f_σ [18], мы, следовательно, предполагаем, что в интервале между $E_\sigma+\Delta E$ и $E_\sigma+\Delta E+d\Delta E$ число термов составляет

$$\frac{f_\sigma}{\sqrt{2\pi\overline{\Delta E_\sigma^2}}}\exp\left\{-\frac{\Delta E^2}{2\overline{\Delta E_\sigma^2}}\right\}d\Delta E.$$

В соответствии с проведенными выше расчетами ориентация полного спинового момента в кристалле остается совершенно неопределенной, если, как мы можем считать на основании результатов опыта Эйнштейна—де Гааза, орбитальные моменты электронов в кристалле взаимно компенсируются. Но если мы поместим кристалл во внешнее магнитное поле напряженностью H, то к внутренней энергии, которая зависит от s, добавится еще и внешняя энергия, зависящая от проекции s на внешнее поле m. По известным формулам для этой дополнительной энергии имеем ($g = 2$ для спина!):

$$E' = -\frac{e}{\mu c}\frac{h}{2\pi}Hm, \quad (s \geqslant m \geqslant -s). \tag{18}$$

(Здесь μ — масса электрона.)

Теперь возникает задача вычислить значение m, наиболее вероятное для заданной температуры и заданной величины H. Мы введем сокращенные обозначения

$$\alpha = \frac{1}{kT}\frac{e}{\mu c}H\frac{h}{2\pi}, \quad \beta = \frac{zJ_0}{kT}. \tag{19}$$

Затем образуем сумму состояний (с точностью до несущественного множителя, не зависящего от α):

$$\sum_{s=0}^{n}\sum_{m=-s}^{+s}\int_{-\infty}^{+\infty} d\Delta E\frac{f_\sigma}{\sqrt{2\pi\overline{\Delta E_\sigma^2}}}\exp\left\{\alpha m+\beta\frac{s^2}{2n}-\frac{\Delta E}{kT}-\frac{\Delta E^2}{2\overline{\Delta E_\sigma^2}}\right\} =$$
$$= \sum_{s=0}^{n}\sum_{m=-s}^{+s} f_\sigma \exp\left\{\alpha m+\beta\frac{s^2}{2n}+\frac{\overline{\Delta E_\sigma^2}}{2k^2T^2}\right\}.$$

Наконец, в соответствии с формулой (17) получаем (снова опуская несущественные множители):

$$S = \sum_{s=0}^{n}\sum_{m=-s}^{+s} f_\sigma \exp\left\{\alpha m+\beta\frac{s^2}{2n}-\beta^2\frac{s^2(4n^2-s^2)}{8n^3z}\right\}. \tag{20}$$

---

[18] Без принципа Паули общее число термов во всех системах, принадлежащих разбиению, было бы равно f_σ^2 вследствие f_σ-кратного вырождения. Однако вырождение снимается принципом Паули.

Обозначая выражение $\exp\left\{\beta\frac{s^2}{2n} - \beta^2\frac{s^2(4n^2-s^2)}{8n^3z}\right\}$ через $g(s)$ и учитывая, что $f_\sigma = \binom{2n}{n+s} - \binom{2n}{n+s+1}$, после изменения порядка суммирования имеем

$$S = \sum_{m=-n}^{+n}\sum_{s=|m|}^{n} e^{\alpha m} g(s)\left[\binom{2n}{n+s} - \binom{2n}{n+s+1}\right].$$

После преобразования, аналогичного интегрированию по частям, находим

$$S = S_1 + S_2 = \sum_{m=-n}^{+n} e^{\alpha m} g(m)\binom{2n}{n+m} + \sum_{s=0}^{n}\sum_{m=-s}^{+s} e^{\alpha m}\left(g(s+1) - g(s)\right)\binom{2n}{n+s+1},$$

$$S_2 = \sum_{s=0}^{n}\frac{e^{\alpha(s+1)} - e^{-\alpha s}}{e^{\alpha} - 1}\left(g(s+1) - g(s)\right)\binom{2n}{n+s+1}.$$

Поскольку $g(s)$ — четная функция s, мы можем в применяемом здесь приближении вычеркнуть в S_2 член с $e^{-\alpha s}$ и затем провести суммирование в пределах от $s = -n$ до $s = +n$. Тогда мы увидим, что с точностью до множителей порядка 1 S_2 также принимает вид S_1 (если индекс суммирования s в S_2 заменить на m).

Наконец, получаем

$$S = F\sum_{-n}^{+n} e^{\alpha m} g(m)\binom{2n}{n+m}, \tag{21}$$

где F — функция величин α и β, имеющая порядок величины 1 (если α и β того же самого порядка величины).

Для дальнейшего вычисления мы будем предполагать, что в S выражение под знаком суммы имеет острый максимум при $m = m_0$ (m_0 приблизительно совпадает со средним значением m), что будет оправдано позднее. Мы положим $m = m_0 + (m - m_0)$ и разложим показатель экспоненты в функции $g(m)$ в ряд по степеням $(m - m_0)$. Мы получаем

$$g(m) \simeq \exp\left\{\beta\frac{m_0^2}{2n} + \beta\frac{m_0}{n}(m - m_0) - \frac{\beta^2}{8n^3z}\left[4m_0^2n^2 - m_0^4 + 8m_0n^2(m - m_0) - 4m_0^3(m - m_0)\right]\right\}.$$

Тогда S, опять до несущественных множителей, не зависящих от α, принимает вид

$$S = F\sum_{m=-n}^{m=n}\exp\left\{\left(\alpha + \beta\frac{m_0}{n} - \beta^2\frac{m_0^3}{2n^3z}\right)m\right\}\binom{2n}{n+m} =$$

$$= F\left[2\,\mathrm{ch}\left(\frac{\alpha + \beta\frac{m_0}{n} - \beta^2\frac{m_0}{nz} + \beta^2\frac{m_0^3}{2n^3z}}{2}\right)\right]^{2n}. \tag{22a}$$

Из S мы находим известным образом наивероятнейшее значение m_0 по формуле

$$m_0 = \frac{\partial}{\partial\alpha}\ln S = n\,\mathrm{th}\left(\frac{\alpha + \beta\frac{m_0}{n} - \beta^2\frac{m_0}{nz} + \beta^2\frac{m_0^3}{2n^3z}}{2}\right). \tag{22}$$

Возникающим при дифференцировании $\ln F$ членом следует пренебречь по сравнению с n. В этом состоит также и оправдание того, что мы учитывали в показателях суммы состояния только высшие степени n и s, т.е. пренебрегали *множителями* порядка 1.

Формула (22) в основном идентична с известной формулой Вейсса для ферромагнетизма. То обстоятельство, что в формулу (22) входит $\operatorname{th} x$ вместо $\operatorname{cth} x - 1/x$ (как у Вейсса), обусловлено тем, что спиновый момент может иметь во внешнем поле только две ориентации. Полагая

$$\frac{m_0}{n} = y; \quad \alpha + \beta\frac{m_0}{n} - \beta^2\frac{m_0}{nz} + \beta^2\frac{m_0^3}{2n^3 z} = 2x, \tag{23}$$

мы получаем уравнения

$$\begin{aligned} &\text{I.} \quad y = \operatorname{th} x, \\ &\text{II.} \quad 2x = \alpha + y\left(\beta - \frac{\beta^2}{z}\right) + \frac{\beta^2}{2z}y^3. \end{aligned} \tag{24}$$

Эти формулы отличаются от формул Вейсса еще и кубическим членом в (24 II). Решения уравнений (24) проще всего получаются опять графически. На рис. 1 такое решение изображено для $\alpha = 0{,}2$, $\beta = 2$, $z = 8$.

Для малых или отрицательных значений постоянной β получается парамагнетизм. Ферромагнетизм появляется, когда касательная к кривой II при $y = 0$ образует с осью x меньший угол, чем касательная к кривой I; при этом влиянием кубического члена вначале пренебрегается. Таким образом, условие для ферромагнетизма имеет вид

$$\beta\left(1 - \frac{\beta}{z}\right) \geqslant 2. \tag{25}$$

Это условие может быть выполнено только для больших значений z. Максимальное значение левой части неравенства (25) ($\beta_{\max} = z/2$) есть $(z/2)(1 - 1/2)$, и мы получаем

$$z \geqslant 8. \tag{26}$$

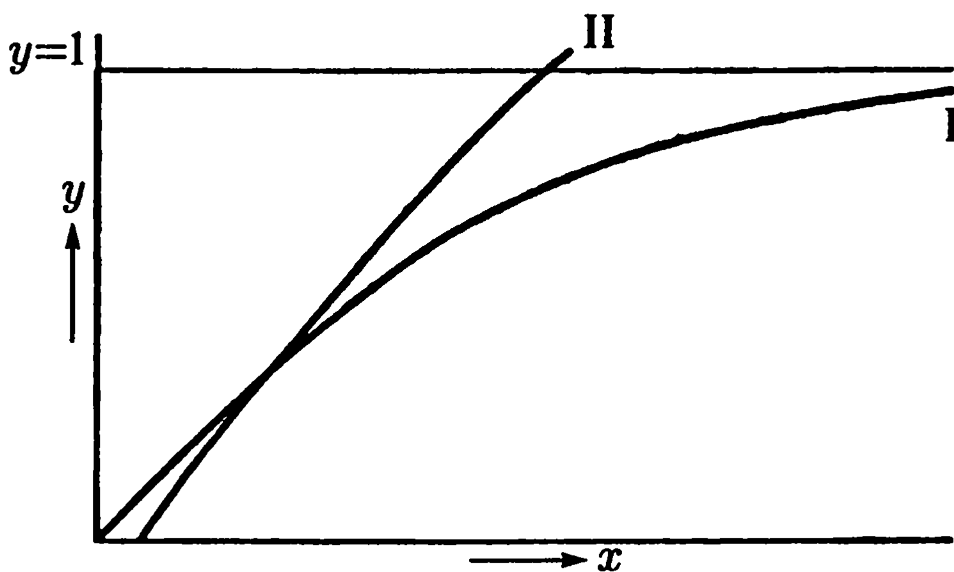


Рис. 1

В соответствии с этим ферромагнетизм возможен только в решетках таких типов, в которых атом имеет по меньшей мере восемь соседей. Это имеет место для Fe, Co, Ni; их решетки все кубические, частью объемноцентрированные ($z = 8$), частью гранецентрированные ($z = 12$). Если учесть в формуле (24 II) еще член третьей степени, то и для примерно $z = 7$ может случиться, что кривая II (для $\alpha = 0$) в начале координат хотя и будет подниматься круче, чем кривая I, но выше эти две кривые все же могут пересекаться в двух точках. Поскольку значение $z = 7$ не встречается даже без этого пересечения, мы не будем придавать этой возможности физического значения.

Если β превышает значение $z/2$ (приращение β соответствует уменьшению температуры), то в соответствии с уравнением (25) сила молекулярного поля снова убывает, и для $\beta > (z/2)(1 + \sqrt{1 - 8/z})$ существует уже только парамагнетизм. Мы не думаем, что этот результат имеет физическое значение. Ведь математически он получается вследствие допущения о гауссовом распределении значений энергии,

имеющем следствие, что и для малых значений s существуют значения термов, которые (при положительной величине J_0) лежат так же глубоко, как энергия, принадлежащая $s = n$, или еще глубже. В действительности же, конечно, ***не существует*** значения энергии, лежащего глубже (если величина J_0 положительна), чем энергия для $s = n$. Отклонения истинной кривой распределения энергий от принятой нами становятся, естественно, все более и более заметными при убывающей температуре.

Развитую здесь теорию следует улучшить путем вычисления для флюктуаций средних значений $\overline{\Delta E^3}$, $\overline{\Delta E^4}$ и т. д. и построения соответственно улучшенных кривых распределения значений термов. В этой улучшенной теории в левой стороне уравнения (25) появятся соответственно более высокие степени β; иначе говоря, левая часть уравнения (25) представляет собой, собственно, трансцендентную функцию β; значение, которое мы получили здесь для левой стороны уравнения (25), примерно соответствует разложению этой функции в ряд по степеням $\beta/z = J_0/(kT)$, оборванный на втором члене (наши члены $\beta - \beta^2/z$ могут, вероятно, лишь незначительно отличаться от первых двух членов истинного степенного ряда для этой функции). Но из этих соображений следует, что для более высоких значений β/z, скажем, $\beta/z \gtrsim 1/2$, исследование ферромагнетизма с помощью высших флюктуационных моментов проводить невозможно. Подобное уточненное исследование кривой распределения будет также зависеть, вероятно, и от граничного значения z (26). Однако качественно наши результаты могут измениться, вероятно, лишь немного.

Если β будет существенно меньше граничного значения, определяемого уравнением (25), то уравнение (24), как уже говорилось, приводит к парамагнетизму. Для малых значений α $\left(\operatorname{th} x \simeq x - \frac{x^3}{3} \ldots\right)$ расчет дает

$$y = \frac{\alpha}{2 - \beta + \frac{\beta^2}{z}} + \frac{\alpha^3}{\left(2 - \beta + \frac{\beta^2}{z}\right)^4} \left(\frac{\beta^2}{2z} - \frac{2}{3}\right) + \ldots . \tag{27}$$

Первый член ряда дает закон Кюри с модификацией, как в теории Вейсса:

$$m_0 \sim \frac{1}{T - \Theta} \frac{T}{T\left(1 + \sqrt{1 - \frac{8}{z}}\right) - \Theta\left(1 - \sqrt{1 - \frac{8}{z}}\right)}.$$

Здесь критическая температура дается формулой

$$\Theta = \frac{2J_0}{k\left(1 - \sqrt{1 - \frac{8}{z}}\right)}.$$

Прежде чем перейти к обсуждению численной величины J_0, я хочу оправдать сделанное ранее утверждение о том, что члены суммы состояния (21) имеют очень острый максимум при $m = m_0$. С этой целью я вычислю средний квадрат флюктуаций m около m_0, т. е. $\overline{\Delta m^2}$. Он дается равенствами

$$\overline{\Delta m^2} = \overline{m^2} - m_0^2$$

и

$$\overline{m^2} = \frac{1}{S} \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha^2}.$$

Из формулы (22а) получаем

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = n\left(e^x + e^{-x}\right)^{2n-1}\left(e^x - e^{-x}\right)F + \frac{\partial F}{\partial \alpha}\left(e^x + e^{-x}\right)^{2n},$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial \alpha^2} = \frac{n(2n-1)}{2}\left(e^x + e^{-x}\right)^{2n-2}\left(e^x - e^{-x}\right)^2 F + \frac{n}{2}\left(e^x + e^{-x}\right)^{2n} F + \\ + 2n\frac{\partial F}{\partial \alpha}\left(e^x + e^{-x}\right)^{2n-1}\left(e^x - e^{-x}\right) + \frac{\partial^2 F}{\partial \alpha^2}\left(e^x + e^{-x}\right)^{2n}.$$

Отсюда в первом приближении имеем

$$\overline{m^2} = m_0^2 + \frac{n}{2}\left(1 - \operatorname{th}^2 x\right) + 2n \operatorname{th} x \frac{\partial \ln F}{\partial \alpha}.$$

Таким образом, получаем

$$\overline{\Delta m^2} = \frac{n}{2}\left(1 - \operatorname{th}^2 x + 4 \operatorname{th} x \frac{\partial \ln F}{\partial \alpha}\right).$$

Вероятное отклонение момента m от ожидаемой величины m_0, следовательно, имеет порядок величины только $\sqrt{n}$, члены в показателе функции $g(m)$, которые были опущены нами в уравнении (22), по порядку величины равны $\Delta m^2/n$, т. е. I — в согласии с проводимой нами здесь степенью приближения. Опущенные члены имеют порядок величины поверхностных эффектов.

§ 4
Величина и знак «молекулярного поля»

Постоянная β по порядку величины должна равняться единице, чтобы ферромагнетизм был возможен; значит, должно быть $J_0 \simeq kT$, где T для Fe, Co, Ni принимает значения порядка 10^3 градусов. Отсюда следует, что $J_0 \simeq 10^{-13}$ Эрг, т. е. составляет около 1/100 энергии основного состояния водорода. Но это — величины как раз того порядка, какого следует ожидать для обменных интегралов вида (I), если атомы располагаются близко друг к другу. Если межатомное расстояние увеличивается, то обменные силы убывают экспоненциально. В этом заключается причина того, что растворы солей железа или никеля никогда не бывают ферромагнитными.

Значительно труднее ответить на вопрос о знаке J_0. Гайтлер и Лондон в своей теории гомеополярной связи сделали предположение, что величина J_0 совершенно общим образом должна быть отрицательной, а это исключало бы ферромагнетизм. Действительно, для частного случая, когда невозмущенные электроны находятся в состоянии $1S$, из совершенно общих положений следует, что значения энергии должны располагаться так, как это соответствует отрицательным значениям J_0. Однако такой вывод применим только для состояния электронов $1S$, и можно показать, что для больших главных квантовых чисел величина J_0 в общем становится положительной. Рассмотрим выражение

$$J_0 = \frac{1}{2}\int \psi_k^{\varkappa}\psi_k^{\lambda}\psi_l^{\varkappa}\psi_l^{\lambda}\left(\frac{2e^2}{r_{kl}} + \frac{2e^2}{r_{\varkappa\lambda}} - \frac{e^2}{r_{\varkappa k}} - \frac{e^2}{r_{\varkappa l}} - \frac{e^2}{r_{\lambda k}} - \frac{e^2}{r_{\lambda l}}\right) d\tau_k\, d\tau_l. \qquad (1)$$

Здесь $\varkappa$ и λ — индексы атомных ядер, k и l — индексы электронов. Возьмем ψ в виде собственных функций водорода; позднее мы покажем, что наши соображения

полностью сохраняют свою силу и для других центральных полей вблизи ядер. Прежде всего, можно определенно утверждать, что для очень малых значений $r_{\varkappa\lambda}$ величина J_0 будет положительной, так как тогда член $1/r_{\varkappa\lambda}$ превосходит все другие. Однако этому результату не следует придавать никакого физического значения, так как для очень малых значений $r_{\varkappa\lambda}$ наш метод приближения становится целиком иллюзорным (см. случай терма $1S$!). Следовательно, речь должна идти о значении J_0 для *больших* $r_{\varkappa\lambda}$. Если величина J_0 там будет положительной, то мы можем предполагать, что она остается положительной вообще для всех значений $r_{\varkappa\lambda}$. Итак, мы рассмотрим теперь, как выглядит распределение плотности заряда $\psi_k^\varkappa\psi_k^\lambda$ при больших расстояниях $r_{\varkappa\lambda}$ сначала для более высоких термов S. Шредингеровские функции содержат в качестве важнейшей части экспоненциальную функцию, и произведение $\psi_k^\varkappa\psi_k^\lambda$ содержит поэтому множитель $\exp\left\{-(r_{k\varkappa}+r_{k\lambda})/(a_0 n)\right\}$ (a_0 здесь — боровский радиус атома водорода, n — главное квантовое число; путаницы с числом электронов $2n$ можно, по-видимому, не опасаться). Если отвлечься от других множителей, то плотность будет, таким образом, постоянной на конфокальных эллипсоидах вращения вокруг обоих ядер (это происходит при каждом значении главного квантового числа). Экспоненциальная функция умножается еще на полином $(n-1)$-й степени относительно $r_{k\varkappa}$ или $r_{k\lambda}$. Все нули этого полинома располагаются вблизи ядер, на большем расстоянии от ядер полином можно заменить высшей из степеней r^{n-1}. Совершенно несущественной оказывается и интенсивность центральных сил на расстояниях от ядра порядка a_0, если только значение $r_{\varkappa\lambda}$ достаточно велико. Распределение плотности заряда по *длине* указанного выше цилиндра будет, следовательно, не однородным, а приблизительно пропорциональным $r_{k\varkappa}^{n-1}r_{k\lambda}^{n-1}$. Для малых значений n это распределение остается еще довольно однородным, и легко видеть, что тогда в интеграле J_0 существенно преобладают отрицательные члены. Напротив, с возрастанием n распределение плотности приобретает все более острый максимум в середине расстояния между двумя ядрами. В пределе очень больших значений n среднее значение членов типа $1/r_{k\varkappa}$, взятое по указанному выше распределению плотности, стремится поэтому к значению $2/r_{\varkappa\lambda}$:

$$\overline{\frac{1}{r_{k\varkappa}}}=\overline{\frac{1}{r_{k\lambda}}}=\overline{\frac{1}{r_{l\varkappa}}}=\overline{\frac{1}{r_{l\lambda}}}\to\frac{2}{r_{\varkappa\lambda}}.$$

Член с $1/r_{kl}$, «собственный потенциал» распределения плотности, напротив, с увеличением n возрастает неограниченно. Следовательно, для достаточно высоких главных квантовых чисел величина J_0 будет, безусловно, положительной. Можно легко показать, что в этом результате ничто не изменится, если выполнить вычисления для состояний $P, D, \ldots$ или каких-нибудь других более высоких состояний. Граничное значение n, при котором величина J_0 впервые становится положительной, точно определить трудно. Примерный расчет привел к результату $n=3$. Это граничное значение, возможно, зависит еще от значений других квантовых чисел. Тот факт, что, например, молекула кислорода в основном состоянии обладает, как показывает опыт, магнитным моментом $2\cdot 1/2\cdot h/(2\pi)$, говорит, по-видимому, за то, что величина J_0 может быть положительной уже при $n=2$. С другой стороны, из многократно наблюдавшихся отрицательных критических температур (например, для γ-железа) можно сделать вывод о том, что и для более высоких главных квантовых чисел величина J_0 иногда бывает отрицательной.

Заключительные замечания

Вычисления, проделанные здесь, определили два условия для появления ферромагнетизма.

1. Кристаллическая решетка должна быть такой, чтобы каждый атом имел по крайней мере 8 соседей.

2. Главное квантовое число электронов ответственных за магнетизм, должно быть $n \gtrsim 3$

Этих двух условий вместе еще недостаточно для того, чтобы выделить Fe, Co, Ni из всех других веществ; однако Fe, Co, Ni удовлетворяют указанным условиям. Можно также ожидать, что развитая здесь теория представляет собой пока только качественную схему, в которую ферромагнитные явления могут войти позднее. Теория нуждается в обобщении на случай обмена несколькими электронами на каждый атом, необходимо провести более подробное изучение интегралов $J_{(kl)}$, а также кривой распределения значений термов. К этим вопросам, а также к подробному сравнению теории с экспериментальными результатами я надеюсь вернуться позднее.

Лейпциг, Институт теоретической физики университета
(Поступила 29 мая 1928 г.)

К КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА*

§1

Сравнение теории с рассмотрением электронов в металлах Паули и Зоммерфельдом

Молекулярное поле, на котором основывается теория ферромагнетизма Вейсса [1], может быть сведено к обменному взаимодействию электронов проводимости ферромагнитного металла [2]. Этот результат получается для модели металла, отличающейся от принятой Паули [3] или Зоммерфельдом [4] в теории электропроводности, и потому прежде всего следует продвигаться шаг за шагом от модели Паули—Зоммерфельда к модели, применяемой ниже.

В первом приближении электроны в металле можно считать совершенно свободными. Тогда можно определить их энергетические уровни, если известны положение границ элементарной ячейки и масса электрона. В каждой «квантовой ячейке» можно разместить два электрона с противоположно направленными спинами; таким образом, пока не учитывается взаимодействие электронов, при низких температурах согласно Паули должен иметь место парамагнетизм при любом распределении энергетических уровней. Если же, как это было сделано в теории Зоммерфельда Хоустоном [5] и несколько детальнее методами теории групп Блохом [6], учесть взаимодействие электронов с решеткой, то скажется, что значения электронных теорем объединяются в группы, которые могут принадлежать некоторому определенному возбужденному состоянию атомов металла. Если первоначально в элементарной сфере находились n атомов и n валентных электронов (частный случай — щелочные металлы!), то каждая группа будет содержать n термов, причем относительные промежутки между ними будут определяться в основном силой связи электронов в атоме. Пока взаимодействие электронов друг с другом не учитывается, вывод Паули о парамагнетизме остается полностью справедливым. Конечно, с ростом силы связи значения термов внутри одной группы все больше сближаются. Ниже некоторого граничного значения расстояния между соседними термами становятся пренебрежимо малыми по сравнению с энергией взаимодействия электронов. Таким образом, в случае достаточно большой силы связи невозмущенное состояние при рассмотрении взаимодействия следует выбирать в виде распределения n электронов по n

* Zur Quantentheorie des Ferromagnetismus. — Probleme der Modernen Physik, A. Sommerfeld Festschrift. Leipzig, 1928. S. 114–122. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Weiss P.* J. de Phys., 1907, **6**, 661.

[2] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1928, **49**, 619 (далее цитируется как «l. c.»). — Русский перевод: с. 382–395.

[3] *Pauli W.* Zs. Phys., 1927, **41**, 81.

[4] *Sommerfeld A.* Zs. Phys., 1928, **47**, 1.

[5] *Houston W.* Zs. Phys., 1928, **48**, 449.

[6] *Bloch F.* Dissertation. Leipzig.

энергетически равнозначным квантовым ячейкам. В этом случае уже не обязательно искать связь между квантовыми ячейками и границами элементарной ячейки решетки, и в качестве n энергетически (но не пространственно) равнозначных квантовых ячеек можно использовать прямо «орбиты электронов» в n атомах по отдельности. Наша теория начинает существенно отличаться от теории Паули тогда, когда мы переходим к учету взаимодействия электронов; действительно, первым следствием этого взаимодействия будет то обстоятельство, что в квантовой ячейке размещается уже только *один* электрон, т. е. что энергия состояний, в которых в ячейке находятся два электрона, намного превышает энергию тех состояний, в которых ячейки содержат только по одному электрону; поэтому в статистике следует рассматривать только эти последние состояния (при достаточно низких температурах).

Поучительную картину различий между изложенными выше модельными представлениями можно также получить, рассматривая поведение теплоемкости «электронного газа». В теории Зоммерфельда[7], где электроны рассматриваются как газ Ферми, их удельная теплоемкость растет с температурой линейно. При учете взаимодействия с решеткой удельная теплоемкость, как показано Блохом[8] сначала линейно возрастает, но затем после достижения максимальной величины опять убывает до нуля; наконец, в нашей модели удельная теплоемкость электронного газа, аналогично так называемой магнитной теплоемкости, возрастает до точки Кюри и затем скачком падает до нуля[9].

§2
Связь теории с квантовомеханической трактовкой валентных сил

Молекулярные силы Вейсса могут быть сведены к обменным силам, сходным с теми, которые были использованы Гайтлером и Лондоном[10] для объяснения гомеополярных валентных сил. Выше точки Кюри эти аналоги валентных сил скачкообразно исчезают и тогда можно только удивляться, почему кристалл вообще еще существует. Однако на атомы металла в решетке помимо этих обменных сил действуют также и силы другого рода. Прежде всего, большую роль играют поляризационные взаимодействия («силы Ван дер Ваальса»), отнюдь не малые по сравнению с обменными силами «первого порядка». Далее следует обратить внимание на то, что атомные остовы в общем случае не обладают сферической симметрией, и их результирующий «орбитальный момент l» не обращается в нуль. Отклонение от сферической симметрии имеет следствием существование значительных квадрупольных моментов; наконец, из-за наличия этих квадрупольных моментов «орбитальные моменты l» в кристалле не могут поворачиваться свободно, в целом они компенсируют друг друга и не оказывают влияния на магнитные свойства кристалла. Если к тому же учесть, что при обменном взаимодействии электронов одного атома с электронами второго атома одни обменные интегралы оказываются положительными, а другие — отрицательными, то станет понятно, что доля обменных сил в энергии связи кристалла довольно мала. По оценке, основанной на рассмотрении отношения полной теплоты намагничивания к теплоте испарения кристалла, эта доля составляет всего лишь несколько процентов. Аналогичные по величине изменения должны происходить при переходе через точку Кюри также с упругими постоянными кристалла, на что любезно обратил внимание

[7] *Sommerfeld A.* Op. cit.

[8] *Bloch F.* Op. cit.

[9] См., например, *Debye P.* Zusammenfassender Bericht über elektrische und magnetische Molekulareigenschaften. Handbuch der Radiologie. Leipzig, 1925. Bd. VI. S. 597; особенно с. 668 и далее.

[10] *Heitler W. London F.* Zs. Phys., 1927, **44**, 455.

в беседе со мной Ф. Лондон. К сожалению, этот эффект экспериментально еще не изучен; если он когда-нибудь будет обнаружен, что мы получим совершенно очевидное механическое доказательство исчезновения валентных сил. Как уже говорилось выше (см. также l. c.), обменные интегралы в известных ферромагнитных веществах могут быть частично положительными, частично отрицательными, и тот факт, что для Fe, Co, Ni они дают в сумме положительный результат, следует рассматривать как своего рода случайность; разумеется, этот результат суммирования зависит также от относительного расположения атомов в решетке; весьма характерно, что в γ-железе, в противоположность α-, β- и δ-железу, итог суммирования становится отрицательным. Парамагнетизм, наблюдаемый в некоторых веществах при низких температурах, также сводится к такому отрицательному молекулярному полю. Безусловно, при рассмотрении экспериментального материала создается общее впечатление, что пройдет еще немало времени, прежде чем теория действительно сможет объяснить эти и многие другие сложные детали. В случае железа, например, в магнетизме участвуют по меньшей мере четыре валентных электрона, так что в теорию с самого начала входят в качестве неизвестных констант 16 обменных интегралов, и с ними можно получить, вероятно, любой желаемый результат, а значит, нельзя сказать ничего определенного. Поэтому мне представляется правильным завершить теорию прежде всего для случая, когда атом содержит один валентный электрон. Однако я все же хочу получить один результат более сложной теории. В соответствии с проделанными до сих пор расчетами казалось, что функция Ланжевена $\operatorname{cth} x - 1/x$ в общем случае должна быть заменена на $\operatorname{th} x$ вследствие двух возможных ориентаций спина электрона. Но опыт твердо говорит о том, что кривая $\operatorname{th} x$ неверна, и поэтому заслуживает внимания доказательство, что в случае, когда атом содержит несколько валентных электронов, также получаются другие функции Ланжевена.

§ 3

Теория групп для случая нескольких валентных электронов в атоме

Теоретико-групповой метод мы можем позаимствовать опять у Гайтлера[11] или Лондона[12]. Пусть в невозмущенном состоянии каждый атом имеет y валентных электронов, причем спины всех электронов для простоты пусть будут параллельны, так что атом находится в состоянии, терм которого принадлежит антисимметричной системе (распределение $1 + 1 + 1 + \ldots + 1$). Пусть общее число атомов в решетке будет $2n$, общее число валентных электронов $2ny = 2N$. Группа перестановок $2N$ электронов содержит в себе качества подгрупп группы перестановок: y электронов в атоме 1, y электронов в атоме 2 и т. д. Те неприводимые матрицы представления (для некоторого заданного распределения), которые принадлежат одной из таких подгрупп, могут быть снова подвергнуты редукции до тех пор, пока они не станут соответствовать неприводимым представлениям упомянутой подгруппы. Допустимо, что такая редукция проделана во всех подгруппах. Если тогда предположить, что взаимодействие y электронов одного атома значительно превосходит взаимодействие

[11] *Heitler W.* Zs. Phys., 1927, **46**, 835.

[12] *London F.* Zs. Phys., 1928, **50**, 24. При незначительных дополнениях теорию Лондона можно было бы, вероятно, применить к рассмотрению случая, когда в невозмущенном состоянии отдельный атом не находится в состоянии, соответствующему терму антисимметричной системы. В противоположность этому проводимые ниже вычисления относятся именно к только что упомянутому частному случаю, тесно примыкая к работе Гайтлера (*Heitler W.* Op. cit.).

электронов различных атомов, то определителю векового уравнения

$$\left|\sum_P b_{ik}^P J_P - \delta_{ik} W\right|$$

можно будет придать форму произведения частных определителей, причем каждый частный определитель состоит из таких строк и столбцов, которые принадлежат определенным неприводимым представлениям каждой отдельной подгруппы. В нашем частном случае нас будут интересовать только неприводимые представления подгрупп с распределением $1+1+\ldots+1$, т. е. однорядные матрицы с элементами $+1$ или -1.

Теперь мы рассмотрим, насколько часто встречаются эти специальные представления в представлении с определенным размещением $2N$ электронов. По Гайтлеру[13] здесь действует простое правило, что в размещениях $2N$ электронов могут встречаться только такие размещения отдельных подгрупп, которые аддитивно складываются в общее размещение. Например, для трех атомов (A, B, C), каждый из которых содержит три электрона $(y = 3)$, размещения $1 + 1 + 1$ могут быть объединены в общее размещение $1+1+1+2+2+2$ четырьмя различными способами, указанными на следующей схеме:

Атом A	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1
Атом B	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1
Атом C	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1	1 + 1 + 1
	1 + 1 + 1 + 2 + 2 + 2	1 + 1 + 2 + 2 + 2 + 1	1 + 2 + 2 + 2 + 1 + 1	2 + 2 + 2 + 1 + 1 + 1

Предположим теперь, что заданное общее размещение σ может быть составлено из размещений $1 + 1 + 1 + \ldots + 1$ различными способами, число которых равно g_σ. Тогда в определителе векового уравнения нас будет интересовать только один частный определитель, имеющий g_σ строк и столбцов (простыми перестановками можно добиться того, что это будут именно *первые* g_σ строк и столбцов); в этом случае матрица представления b_{ik}^P, принадлежащая перестановке электронов некоторого *отдельного* атома, должна содержать в первых g_σ строках и столбцах только диагональные элементы, и притом лишь $+1$ или -1, в зависимости от того, будет перестановка четной или нечетной.

Далее мы снова вычислим суммы корней, а также суммы квадратов корней этого частного определителя векового уравнения, а затем определим с помощью этих двух сумм центр терма и средний квадрат флюктуаций. Мы будем учитывать только те обменные интегралы J_P, которые соответствуют простым перестановкам электронов различных атомов. Дело в том, что обменные интегралы, соответствующие перестановкам электронов одного и того же атома, при наших вычислениях можно рассматривать в качестве аддитивных постоянных. Сумма корней, как известно, определяется соотношением

$$\sum_1^{g_\sigma} E_k = \sum_1^{g_\sigma} \sum_P b_{ii}^P J_P. \tag{1}$$

Теперь мы воспользуемся уравнением[14]

$$\sum_R b_{ii}^R = \chi_\sigma^R \frac{h_R}{f_\sigma}. \tag{2}$$

[13] *Heitler W.* Op. cit.

[14] Там же, уравнение (18).

Слева суммирование выполняется по всем перестановкам класса R, h_R означает число перестановок в R, прочие величины имеют обычный смысл.

Вводя для перестановок электронов в атоме 1 обозначение T_1, в атоме 2 — T_2 и т. д., для всех прочих перестановок — T, мы, следовательно, имеем

$$\sum_{T_1} b_{ii}^{T_1} + \sum_{T_2} b_{ii}^{T_2} + \ldots + \sum_{T} b_{ii}^{T} = \chi_\sigma^{(12)} \frac{\binom{2N}{2}}{f_\sigma}.$$

Теперь

$$b_{ii}^{T_1} = b_{ii}^{T_2} = \ldots = -1;$$

значит,

$$\sum_{T_1} b_{ii}^{T_1} = \sum_{T_2} b_{ii}^{T_2} = \ldots = -\binom{y}{2},$$

и поэтому

$$\sum_{T} b_{ii}^{T_1} = \chi_\sigma^{(12)} \frac{\binom{2N}{2}}{f_\sigma} + 2n\binom{y}{2}. \tag{3}$$

Число различных T есть

$$\binom{2N}{2} - 2n\binom{y}{2} = \frac{2N(2N-1) - 2ny(y-1)}{2} = N(2N-y).$$

По соображениям симметрии различные T будут входить в конечный результат равносильно, и потому имеем

$$\sum_{k=1}^{g_\sigma} E_k = \frac{g_\sigma}{f_\sigma} \sum_{T} J_T \frac{\chi_\sigma^{(12)}\binom{2N}{2} + 2nf_\sigma\binom{y}{2}}{N(2N-y)}. \tag{4}$$

При вычислении $\sum_{k=1}^{g_\sigma} E_k^2$ следует принять во внимание, что, взяв уравнение

$$\left|\sum b_{ik}^{P} J_P - W\delta_{ik}\right| = 0$$

и умножив его на определитель $|\sum b_{ik}^{P'} J_{P'} + W\delta_{ik}|$, в общем случае можно получить уравнение

$$\left|\sum_{PP'}\sum_{l} b_{il}^{P} b_{lk}^{P'} J_P J_{P'} - W^2\delta_{ik}\right| = 0.$$

Аналогичным способом можно получить совершенно общее соотношение $\left(\sum_l b_{il}^{P} b_{lk}^{P'} = b^{PP'}\right)$:

$$\sum_{l=1}^{f_\sigma} W_l^k = \sum_{P,P',\ldots,P^{(k)}} \chi^{PP'\ldots P^{(k)}} J_P J_{P'} \ldots J_{P^{(k)}}. \tag{5}$$

В нашем частном случае снова, учитывая только g_σ первых строк и столбцов, мы получаем

$$\sum_{k=1}^{g_\sigma} E_k^2 = \sum_{P,P'} \sum_{i=1}^{g_\sigma} b_{ii}^{PP'} J_P J_{P'}. \tag{6}$$

В дальнейшем при вычислении сумм $\sum_{i=1}^{g_\sigma} b_{ii}^{PP'}$ следует различать три возможных случая: 1) $P = P'$; 2) P и P' имеют один общий элемент; 3) P и P' не имеют ни одного общего элемента. Поскольку в качестве P рассматриваются только перестановки, то в случае 1) имеем

$$b_{ii}^{PP'} = b_{ii}^{E} = 1.$$

В случае 2) имеются три типа величин b: тип $b_{ii}^{T_1T_1'}$; тип $b_{ii}^{T_1T}$; тип $b_{ii}^{TT'}$.

Имеем $b_{ii}^{T_1T_1'} = 1$; $b_{ii}^{T_1T} = -b_{ii}^{T}$; следовательно,

$$b_{ii}^{T_1T} = -\frac{1}{N(2N-y)} \left\{ \chi_\sigma^{(12)} \frac{\binom{2N}{2}}{f_\sigma} + 2n \binom{y}{2} \right\}.$$

Величины $b_{ii}^{TT'}$ мы вычислим с помощью уравнения (2).

Всего тип $b_{ii}^{T_2T_1'}$ встречается $2\binom{y-1}{2} y2n$ раз, тип $b_{ii}^{T_1T}$ — $2(y-1)(2N-y)2N$ раз, а тип $b_{ii}^{TT'}$ — $2\binom{2N-y}{2} 2N$ раз. Однако в последнем типе содержится еще $2\binom{y}{2}(2n-1)2N$ величин $b_{ii}^{TT'}$, в которых оба необщих элемента T и T' принадлежат одному и тому же атому; эти величины $b_{ii}^{TT'}$ равны аналогичным величинам типа $b_{ii}^{T_1T}$. Таким образом, окончательно имеем

$$\begin{gathered} 2\binom{y-1}{2} y2n - \frac{2}{N(2N-y)} \left\{ \frac{\chi_\sigma^{(12)} \binom{2N}{2}}{f_\sigma} + 2n \binom{y}{2} \right\} \times \\ \times \left\{ (y-1)(2N-y)2N + \binom{y}{2}(2n-1)2N \right\} + \\ + 2\left\{ \binom{2N-y}{2} 2N - \binom{y}{2}(2n-1)2N \right\} b_{ii}^{TT'} = \chi_{ii}^{(123)} \frac{3h^{(123)}}{f_\sigma}. \end{gathered} \tag{7}$$

В правой части здесь вместо $h^{(123)}$ входит $3h^{(123)}$, потому что всякая перестановка (123) может быть представлена в виде произведения двух перестановок тремя различными способами; далее $h^{(123)} = 2\binom{2N}{3}$.

Следовательно, мы получаем

$$b_{ii}^{TT'} = \frac{1}{2N(2N-y)(N-y)} \times$$
$$\times \left(\frac{\chi_\sigma^{(123)}}{f_\sigma} + 3(y-1)\left\{ \frac{\chi_\sigma^{(12)}}{f_\sigma} \binom{2N}{2} + 2n\binom{y}{2} \right\} - \binom{y-1}{2} 2N \right). \quad (8)$$

Аналогичные вычисления мы должны проделать еще для третьего случая (P и P' не имеют *ни одного* общего элемента); здесь снова следует различать три указанных выше типа. Здесь тип $b^{T_1T_1'}$ встречается

$$\left\{ \left[2n\binom{y}{2} \right]^2 - 2n\binom{y}{2} - 2\binom{y-1}{2} 2N \right\} \text{ раз,}$$

тип b^{T_1T} —

$$2\left\{ 2n\binom{y}{2} N(2N-y) - (y-1)(2N-y)2N \right\} \text{ раз,}$$

наконец, $b^{TT'}$ —

$$\left\{ N^2(2N-y)^2 - N(2N-y) - 2\binom{2N-y}{2} 2N \right\} \text{ раз.}$$

Поскольку

$$h^{(12)(34)} = \frac{N(2N-1)[N(2N-5)+3]}{2},$$

мы получаем поэтому

$$b_{ii}^{TT'} = \frac{1}{N(2N-y)[N(2N-y-4)+1+2y]} \times$$
$$\times \left(\frac{\chi_\sigma^{(2)(34)}}{f_\sigma} N(2N-1)[N(2N-5)+3]2(N-2)(y-1) \times \right.$$
$$\left. \times \left\{ \frac{\chi_\sigma^{(12)}}{f_\sigma} \binom{2N}{2} + 2n\binom{y}{2} \right\} - N(y-1)[N(y-1)-1-2y] \right). \quad (9)$$

К счастью, для дальнейших вычислений эти формулы могут быть существенно упрощены. Прежде всего, из уравнения (4) следует

$$\overline{E} = \sum_T J_T b_{ii}^T, \quad (10)$$

а из уравнения (6)

$$\overline{E^2} = \sum_T \sum_{T'} b_{ii}^{TT'} J_T J_{T'},$$

и мы имеем

$$\overline{\Delta E^2} = \sum_T \sum_{T'} \left(b_{ii}^{TT'} - b_{ii}^T b_{ii}^{T'} \right) J_T J_{T'} = A_{TT'} J_T J_{T'}. \quad (11)$$

Сохраним в $\bar{E}$ и $\overline{\Delta E^2}$ только высшие степени N. Тогда после подстановки значений χ_σ (общее размещение $(N+s)+(N-s)$) из l. c. получим

$$\bar{E} = -\frac{s^2+N^2}{2N^2}\sum_T J_T. \qquad (12)$$

Аналогично, для трех видов значений $A_{TT'}$ имеем

$$A_{(12)(12)} = \frac{(N^2-s^2)(3N^2+s^2)}{4N^4}, \qquad (13)$$

$$A_{(12)(13)} = \frac{(N^2-s^2)s^2}{4N^4}. \qquad (14)$$

Само собой разумеется, уравнения (12), (13), (14) согласуются с соответствующими уравнениями (l. c.) для $y=1$, поэтому что значения y во всех формулах входят только в члены, содержащие N в следующей по порядку более низкой степени. Отклонение можно ожидать только для величин $A_{(12)(34)}$, в которых высшие степени N взаимно компенсируются.

Разлагая b_{ii} по степеням $1/N$ с точностью до второго члена, получаем

$$b_{ii}^{(12)} = \frac{1}{2}\left(1+\frac{y}{2N}\right)\left[1+\left(\frac{s}{N}\right)^2+\frac{y-3+\frac{s}{N}}{N}\right],$$

$$b_{ii}^{(12)(34)} = \frac{1}{4}\left(1+\frac{y+2}{N}\right)\left\{\left[1+\left(\frac{s}{N}\right)^2\right]^2+\frac{2y-8+2\frac{s}{N}+(2y-12)\left(\frac{s}{N}\right)^2+2\left(\frac{s}{N}\right)^3}{N}\right\}$$

и

$$A_{(12)(34)} = -\frac{(N^2-s^2)s^2}{2N^5}. \qquad (15)$$

Хотя в значениях b_{ii} и возникают отклонения, но в формуле для $A_{(12)(34)}$ они взаимно компенсируются, и поэтому она согласуется с соответствующей формулой работы l. c.

Значения $\bar{E}$ и $\overline{\Delta E^2}$ для некоторого определенного размещения $(N-s)+(N+s)$ можно вычислить по формулам (12) –(15) при условии, что обменные интегралы J_T известны. Например, в предположении, что все J_T двух соседних атомов равны между собой ($=J_0$), «число соседей» z (см. l. c.) просто умножается на y, и конечные формулы имеют вид

$$\bar{E} = -zy\frac{s^2+N^2}{2N}J_0 \quad (+\mathrm{const}),$$

$$\overline{\Delta E^2} = +J_0^2 zy\frac{(N^2-s^2)(3N^2-s^2)}{4N^3}.$$

Однако предположение о равенстве обменных интегралов для различных электронов выглядит физически совершенно неоправданным, и мы должны оставить здесь обменные интегралы в виде неопределенных постоянных.

§ 4

Статистический вывод формул Ланжевена—Вейсса

Статистическая часть теории может быть развита на основе существующих на сегодня данных только при произвольном предположении, что значения термов,

принадлежащие одному размещению, подчиняются распределению Гаусса (см. l. c.). Это предположение, без сомнения, делается временно, за неимением ничего лучшего, и его надо расценивать как поистине досадный пробел в теперешней теории, который пока еще не удалось заполнить. Более точные вычисления Пайерлса, относящиеся к средним значениям высших степеней флюктуаций $\overline{\Delta E^l}$, показали, что частный вид функции распределения в форме кривых Гаусса оказывает большое влияние на конечный результат и что функция распределения не может быть улучшена, если учесть следующие моменты флуктуаций $\overline{\Delta E^3}$ и т. д. Улучшить функцию распределения возможно только на основе таких моментов $\overline{\Delta E^l}$, для которых l по порядку величины совпадает с N, так что их вычисление сопряжено с необычайно сложными математическими проблемами. Итак, решающее значение имеет характер спада функции распределения вдали от максимума, а выяснить характер этого спада по значениям $\bar{E}$ и $\overline{\Delta E^2}$ вряд ли возможно. Поставленный вопрос математически сводится к вычислению суммы $\sum\limits_l e^{E_l/kT}$, распространенной на все значения термов E_l, принадлежащие некоторому определенному неприводимому представлению. Легко показать, что эта сумма может быть записана в виде разложения в ряд по степеням $1/kT$, коэффициенты которого определяются характерами группы соответствующего размещения и обменными интегралами (см. уравнение (5)). Однако это не облегчает численный расчет указанной функции kT. В литературе я не нашел методов решения этой чисто математической задачи. Таким образом, пока мы вынуждены довольствоваться паллиативным предположением о гауссовом распределении, отказываясь от удовлетворительного вывода формул Вейсса. Строго можно лишь показать, что *при достаточно низких температурах все векторы спина обязательно устанавливаются параллельно*, т. е. что наступает полное насыщение (равенство $s = N$ дает наинизшее значение энергии). Правда, этот результат, согласно Ленцу и Изингу[15], еще не равнозначен ферромагнетизму, поскольку, критическая температура Θ'' может зависеть также от N (для модели Изинга — линейной цепочки — $\Theta \sim \mathrm{const}/\ln N$); модель, положенная в основу излагаемой здесь теории, обладает большим сходством с моделью Изинга (взаимодействуют только соседние атомы), отличаясь от нее в основном лишь величиной z, т. е. числом соседей, окружающих каждый атом. Существенную роль величины z показывает формула для $\overline{\Delta E^2}$; однако на вопрос о том, становятся ли формулы Вейсса правильными при значениях $z \geqslant 8$, теория пока не может дать определенного ответа.

Возвратимся после этих критических замечаний к нашей временной программе, т. е. к выводу формул Вейсса в предположении о гауссовом распределении для $y \neq 1$; вследствие уравнений (12)–(15) единственное отличие от соответствующих расчетов для случая $y = 1$ (l. c.) состоит в том, что f_σ заменяется на полное число значений термов g_σ. Как и в упомянутом случае, из простых модельных соображении можно сделать вывод, что $g_{(N+s)+(N+s)} = f(s) - f(s+1)$, где $f(s)$ означает полное число возможных термов, принадлежащих при заданном значении y некоторому определенному магнитному квантовому числу m, а именно $m = s$. Точно таким же образом, как в l. c., сумма состояний тоже может быть приведена к следующему виду

$$S = F \sum_{-N}^{+N} f(m) e^{2xm}, \tag{16}$$

где x есть функция среднего значения m_0 квантового числа m (см. l. c., уравнение (23)), в первом приближении линейная относительно комбинаций

[15] *Ising E.* Zs. Phys., 1925, **31**, 253.

(H — внешнее магнитное поле)

$$\alpha = \frac{1}{kT}\frac{e}{\mu c}\frac{h}{2\pi}H, \qquad \beta_T = \frac{J_T}{kT}.$$

Тогда из вида $f(m)$, соответствующего принятой модели, немедленно следует, что уравнение (16) можно преобразовать к форме:

$$S = F\left[e^{xy} + e^{x(y-1)} + \ldots + e^{-xy}\right]^{2n}. \tag{17}$$

Отсюда следует

$$m_0 = \frac{\partial}{\partial\alpha}\ln S \approx n\frac{ye^{xy} + (y-1)e^{x(y-1)} + \ldots - ye^{-xy}}{e^{xy} + e^{x(y-1)} + \ldots + e^{-xy}}. \tag{18}$$

Таким образом, вместо впервые примененной Ленцем[16] функции $\operatorname{th} x$, которая была получена также в l. с., здесь появляется более сложная функция Ланжевена, которая в конце концов приближается к кривой $\operatorname{cth} x - 1/x$ при больших значениях y. Сопоставление различных функций Ланжевена с опытом было проведено в обзорной статье Дебая[17].

Итак, выше было показано, что в тех случаях, когда магнитные свойства определяются несколькими валентными электронами одного атома, в формулах теории ферромагнетизма встречаются, как и следовало ожидать, более сложные функции Ланжевена. При этом можно также считать, что представление о молекулярных силах Вейсса как обменных силах соответствует экспериментальным фактам.

В заключение я хотел бы сказать, что в соответствии с полученными выше результатами аналогию между силами Вейсса и гомеополярными валентными силами можно считать правильной, однако количественные окончательные формулы требуют дополнительной проверки ввиду упомянутых выше математических трудностей, с одной стороны, а с другой — они еще не могут применяться непосредственно к данным опыта, так как, мы не знаем, чему равны обменные интегралы.

---

[16] *Lenz W.* Zs. Phys., 1920, **21**, 613.

[17] *Debye P.* Op. cit.

К ТЕОРИИ МАГНИТОСТРИКЦИИ И КРИВОЙ НАМАГНИЧИВАНИЯ*

Обсуждается вопрос о том, какое место занимает в квантовой теории ферромагнетизма гипотеза о спонтанно намагниченных элементарных областях. Затем эта гипотеза применяется для вычисления магнитострикции кристаллов железа ниже намагничения в насыщении; далее обсуждается особенность упругих постоянных таких кристаллов; наконец, рассматриваются предложенные Беккером и Акуловым объяснения явлений гистерезиса.

Теория ферромагнетизма Вейсса в ее квантовотеоретической формулировке пока дает удовлетворительное объяснение тех ферромагнитных явлений, в которых можно пренебрегать магнитными взаимодействиями между элементарными магнитами; это значит, что теория правильно воспроизводит свойства ферромагнитных тел в полях, превышающих 10^4 или 10^5 Гаусс. Напротив, к явлениям, происходящим ниже намагничения в насыщении, теория может быть применена только в том случае [1], если учитываются магнитные взаимодействия спиновых магнитных моментов и аналогичные им эффекты [2]. Термин «намагничение в насыщении» мы будем понимать здесь в том же смысле, в каком это делают физики-экспериментаторы, так что под этим термином подразумевается *независящее* от температуры намагничение, существующее по теории Вейсса в полях выше 10^5 Гаусс, а не почти параллельная ориентация спинов всех электронов. В последнее время появилось несколько важных работ, в которых было показано, что магнитострикция монокристаллов может быть объяснена магнитными взаимодействиями элементарных магнитов, причем сознательно [3] или бессознательно [4] делалось предположение о том, что параллельное выстраивание магнитных моментов происходит благодаря одним только обменным силам Вейсса, без участия магнитных сил. Затем Беккер [5] и Акулов [6] указали на связь между магнитострикцией и кривой намагничивания.

Акулов экстраполировал свои результаты также на случай, когда намагничение значительно меньше, чем в насыщении; против этого, на мой взгляд, можно привести очень веские теоретические возражения, и в следующих ниже расчетах

---

* Zur Theorie der Magnetostriktion und der Magnetisierungskurve. — Zs. Phys., 1931, **69**, 287–297. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] Это обстоятельство не было учтено Хонда К. (*Honda K.* Zs. Phys., 1930, **63**, 141) и Н. Акуловым (Zs. Phys., 1930, **64**, 559).

[2] См. обстоятельные исследования Ф. Блоха и Г. Гентиле (работа *Bloch F., Gentile G.* с подробным изложением их исследования направлена в Zs. Phys.).

[3] *Акулов Н.* Zs. Phys., 1928, **52**, 389; 1929, **54**, 582; 1929, **57**, 249; 1929, **59**, 254; 1930, **64**, 817; 1930, **66**, 534; Zs. Phys., 1931, **32**, 107.

[4] *Mahayani G.* Phil. Trans., 1929, (A) 228, 63; *Becker R.* Zs. Phys., 1930, **62**, 553; 1930, **64**, 660.

[5] *Becker R.* Zs. Phys., 1930, **62**, 553; 1930, **64**, 660.

[6] *Акулов Н.* Zs. Phys., 1928, **52**, 389; 1929, **54**, 582; 1929, **57**, 249; 1929, **59**, 254; 1930, **64**, 817; 1930, **66**, 534; Zs. Phys., 1931, **32**, 107.

будет показано, что экстраполяция Акулова в некоторых местах дает неверные результаты[7)].

§1

Состояние ферромагнитного монокристалла, намагничение которого меньше, чем в насыщении, в последнее время подробно изучалось Блохом. Хотя исследования Блоха еще не закончены, мы упомянем здесь некоторые важные для последующего изложения результаты, которые можно считать твердо установленными. В магнитном отношении кристалл распадается — как всегда предполагалось до сих пор — на нитевидные элементарные области, внутри которых кристалл намагничивается до насыщения (не зависящего от температуры). Перемагничивание кристалла, например, при изменении внешнего поля происходит не путем поворота элементарных областей заданной формы, а путем перемещения границ элементарных областей, причем области с одним направлением спина растут за счет областей с другим направлением спина. Отсюда следует, что перемагничивание в общем случае не связано с изменением энергии и что в монокристаллах распределение элементарных областей в заданных внешних полях (а возможно, и при заданных дефектах решетки) может быть определено в статистически равновесном состоянии, независимо от вопроса об установлении равновесия. На основе этих представлений ниже будут рассмотрены магнитострикция и родственные ей явления в области ниже намагничения в насыщении. Следует подчеркнуть, что совершенно аналогичные рассуждения уже не раз встречались в литературе, однако мне неизвестно, применялись ли они к обсуждаемым ниже проблемам.

Вначале я хотел бы обсудить простой частный случай, а именно монокристалл кобальта, с целью разъяснить применяемый метод. Если мы выберем в качестве оси x гексагональную ось и введем обозначения $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ для направляющих косинусов вектора намагниченности, то магнитно-дипольная часть свободной энергии единицы объема кристалла *в случае насыщения* приобретает вид

$$F = C_0 - C_1\alpha_1^2, \tag{1}$$

в чем можно без труда убедиться на основании соображений симметрии. Для кобальта эмпирическое значение C_1 положительно. Будем теперь искать свободную энергию как функцию намагниченности J (на единицу объема) с компонентами J_x, J_y, J_z. Ради простоты будем полагать $J_z = 0$. Намагниченность в насыщении будем обозначать J_∞.

Уравнение (1) может быть применено также к отдельным элементарным областям, так как они намагничены до насыщения. Отсюда следует, что в немагнитном состоянии все элементарные области выстраиваются параллельно или антипараллельно оси (по направлению наилегчайшего намагничивания), так как это состояние обладает наименьшей энергией. Наиболее вероятным будет, естественно, такое состояние, в котором параллельные и антипараллельные оси ориентации областей распределяются поровну. Для того, чтобы теперь намагнитить кристалл параллельно оси, сколько-нибудь заметных затрат энергии не требуется, так как при опрокидывании областей энергия в соответствии с формулой (1) не изменяется. Несколько увеличивается только свободная энергия, так как энтропия при ориентировании уменьшается. Происходящими при этом изменениями этих величин, которые были оценены Блохом [4], мы будем в дальнейшем пренебрегать. Однако

[7)] В недавно опубликованной работе Акулов (Zs. Phys., 1931, **67**, 794), отступая от своих предыдущих исследований, принимает обычную гипотезу элементарных областей и тем самым отказывается от так называемого «закона анизотропии» в области ниже намагничения в насыщении.

для намагничивания перпендикулярно оси необходимо повернуть все элементарные области на некоторый угол от оси x, причем наиболее вероятным будет поворот всех областей на один и тот же угол. Если среднее число областей в единице объема будет N, т.е. если их средний объем равен $1/N$, то энергия одной области будет отличаться от энергии в немагнитном состоянии в среднем на

$$\frac{1}{N}C_1(1-\alpha_1^2) = \frac{1}{N}C_1\left(\frac{J_y}{J_\infty}\right)^2.$$

Следовательно, энергия единицы объема составит

$$C_1\left(\frac{J_y}{J_\infty}\right)^2.$$

Наконец, полная свободная энергия с учетом внешнего магнитного поля $\mathrm{H}(H_x, H_y)$ и коэффициента размагничивания γ принимает вид

$$F = F_0(y) + C_1\left(\frac{J_y}{J_\infty}\right)^2 - H_xJ_x - H_yJ_y + \frac{\gamma}{2}J^2. \tag{2}$$

При этом $F_0(J)$ означает функцию, которая, как было упомянуто выше, при $J < J_\infty$ имеет практически постоянное значение, а в окрестности $J = J_\infty$ по теории Вейсса возрастает чрезвычайно резко, так что при полях порядка 10^4 Гаусс невозможно выйти за пределы J_∞. Из формулы (2) получается система уравнений для кривой намагничивания

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial J_x} &= \frac{\partial F_0}{\partial J}\frac{J_x}{J} - H_x + \gamma J_x = 0, \\ \frac{\partial F}{\partial J_y} &= \frac{\partial F_0}{\partial J}\frac{J_y}{J} + \left(\frac{2C_1}{J_\infty^2} + \gamma\right)J_y - H_y = 0. \end{aligned} \tag{3}$$

Следовательно, для

$$J_x^2 + J_y^2 < J_\infty^2$$

получается

$$J_x = \frac{1}{\gamma}H_x, \quad J_y = \frac{1}{\gamma + \frac{2C_1}{J_\infty^2}}H_y, \tag{4}$$

а для $J_x^2 + J_y^2 = J_\infty^2$ после исключения $\partial F_0/\partial J$ имеем

$$\frac{2C_1}{J_\infty^2} - \frac{H_y}{J_y} + \frac{H_x}{J_x} = 0. \tag{5}$$

Уравнения (3)–(5) дают качественное а после соответствующего выбора постоянной C_1 и количественное объяснение опытов Кая[8].

[8] *Kaya S.* Sc. Reports Tôhoku Imperial Univ. Tokio, 1928, **17**, 1157.

§2

Теперь мы применим указанный метод для вычисления магнитострикции монокристаллов железа. Оси легчайшего намагничивания в железе направлены по ребрам куба, т.е. 100, 010, 001. Таким образом, мы должны предполагать, что в намагниченном состоянии элементарные области ориентируются параллельно ребрам куба, причем на каждое из шести направлений ребер приходится одно и то же число областей.

Рассмотрим сначала, как изменяется распределение, если задано некоторое определенное намагничивание, параллельное оси 100. Для статистического расчета мы позволим себе предполагать, что все элементарные области одинаковы по величине и что их общее число N задано. Такое упрощение, строго говоря, недопустимо, следовало бы, собственно, воспользоваться детальной статистикой элементарных областей в духе исследований Блоха. Но так как конечный результат не содержит ни размеров, ни числа областей, то указанное упрощение как будто не должно приводить к заметным ошибкам. Итак, пусть N_1 областей ориентированы параллельно оси x, т.е. направлению 100, N_3 областей расположены антипараллельно этому направлению, а число областей во всех остальных четырех направлениях пусть будет N_2. Тогда вероятность некоторого определенного распределения N_1, N_2, N_3 будет

$$W = \frac{N!}{N_1!N_2!N_3!}\left(\frac{1}{6}\right)^{N_1}\left(\frac{4}{6}\right)^{N_2}\left(\frac{1}{6}\right)^{N_3}. \qquad (6)$$

Отсюда можно получить приближенное равенство

$$\ln W = N\ln N - N_1\ln N_1 - N_2\ln N_2 - N_3\ln N_3 + N_1\ln\frac{1}{6} + N_2\ln\frac{2}{3} + N_3\ln\frac{1}{6}. \qquad (7)$$

Дополнительные условия для распределения имеют вид

$$\begin{aligned} N_1 + N_2 + N_3 &= N, \\ N_1 - N_3 &= N\frac{J}{J_\infty} = N\delta. \end{aligned} \qquad (8)$$

Таким образом, для максимума $\ln W$ получаются условия (λ, μ — множители Лагранжа)

$$\begin{aligned} -\ln N_1 - 1 + \ln\frac{1}{6} + \lambda + \mu &= 0, \\ -\ln N_2 - 1 + \ln\frac{2}{3} + \lambda \qquad &= 0, \\ -\ln N_3 - 1 + \ln\frac{1}{6} + \lambda - \mu &= 0, \end{aligned}$$

и отсюда следует

$$16N_1N_3 = N_2^2. \qquad (9)$$

Исключая N_2 и N_3 из условий (8) и подставляя результат в соотношение (9), находим

$$16N_1(N_1 - N\delta) = (N - 2N_1 + N\delta)^2,$$

или после подстановки $N_1/N = x$,

$$16x(x - \delta) = (1 - 2x + \delta)^2$$

и

$$x = \frac{3\delta - 1}{6} + \frac{1}{3}\sqrt{3\delta^2 + 1}. \tag{10}$$

Получаем также

$$\frac{N_2}{N} = \frac{4}{3} - \frac{2}{3}\sqrt{3\delta^2 + 1}, \qquad \frac{N_3}{N} = -\frac{3\delta + 1}{6} + \frac{1}{3}\sqrt{3\delta^2 + 1}, \qquad \delta = \frac{J}{J_\infty}. \tag{11}$$

Для вычисления магнитострикции как функции намагниченности теперь необходимо еще изучить магнитострикцию элементарных областей. Поскольку элементарные области намагничены до насыщения, мы можем воспользоваться формулами Акулова. Относительное изменение длины области, измеренное в направлении $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ при направлениях намагниченности $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, определяется формулой

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{\alpha,\beta} = c + \varkappa_1 \sum_{i \neq j} \alpha_i^2 \beta_j^2 - \varkappa_2 \sum_{i=j} \alpha_i \beta_i \alpha_j \beta_j. \tag{12}$$

Эту формулу можно также получить из соображений симметрии, совсем не прибегая к суммированию по решетке. Аддитивная постоянная c в формуле (12) говорит о том, что можно определять только различия в изменении длины по различным направлениям, так как при заданной температуре немагнитное состояние элементарной области не реализуется.

Если же направление намагниченности совпадает с одной из главных осей, то мы получаем:

а) для продольного эффекта $(\alpha_i = \beta_i)$

$$\frac{\delta l}{l} = c; \tag{13}$$

б) для поперечного эффекта $(\sum_i \alpha_i \beta_i = 0)$

$$\frac{\delta l}{l} = c + \varkappa_1. \tag{14}$$

Наконец, для полного относительного изменения длины вдоль оси x получаем отсюда

$$\frac{\delta l}{l} = c\frac{N_1}{N} + (c + \varkappa_1)\frac{N_2}{N} + c\frac{N_3}{N} = c + \varkappa_1 \frac{N_2}{N}. \tag{15}$$

В немагнитном состоянии мы полагаем $\delta l / l = 0$ и соответственно имеем

$$0 = c + \frac{3}{2}\varkappa_1. \tag{16}$$

В состоянии полного насыщения $(N_2 = N_3 = 0)$ получаем

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{\text{нас}} = \lambda_0 = c. \tag{17}$$

Следовательно, постоянные c и $\varkappa_1$ определяются из уравнений

$$c = \lambda_0; \quad \varkappa_1 = -\frac{2}{3}\lambda_0. \tag{18}$$

Для железа эмпирическое значение λ_0 составляет приблизительно $1{,}95 \cdot 10^{-5}$. Впрочем, из формулы (12) следует, что при $\varkappa_1 = -\frac{2}{3}\lambda_0$ и $c = \lambda_0$ магнитострикция происходит без изменения объема.

Для магнитострикции при умеренных значениях намагниченности из соотношений (15), (11) и (8) получается

$$\frac{\delta l}{l} = \lambda_0 - \frac{3}{2}\lambda_0\left(\frac{4}{3} - \frac{2}{3}\sqrt{3\delta^2+1}\right) = +\lambda_0\left(-1 + \sqrt{1 + 3\left(\frac{J}{J_\infty}\right)^2}\right). \qquad (19)$$

Перейдем теперь к аналогичным вычислениям для грани 111. При намагничивании по грани 111 элементарные области сначала ориентируются в основном вдоль прилегающих к грани 111 ребер, причем намагничивание может происходить без заметного изменения энергии, пока все элементарные области не будут выстроены по направлениям этих ребер. Тогда намагниченность в грани 111 станет равной $J_\infty/\sqrt{3}$. До этого момента магнитострикция была точно равной нулю. Действительно, из формулы (12) следует

$$\beta_1 = \beta_2 = \beta_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \qquad \left(\frac{\delta l}{l}\right)_{100;111} = \lambda_0\left(1 - \frac{3}{2}\sum_{i\neq j}\alpha_i^2\beta_j^2\right) = 0. \qquad (20)$$

Начиная с намагниченности $J = J_\infty/\sqrt{3}$, элементарные области отклоняются от ребер куба, и все они одинаково участвуют в магнитострикции. Если ε обозначает косинус угла, который образует с гранью 111 область, первоначально ориентированная по оси 100, то имеют место соотношения

$$\alpha_1 = \varepsilon\frac{1}{\sqrt{3}} + \sqrt{\frac{2}{3}(1-\varepsilon^2)}, \quad \varepsilon = \frac{J}{J_\infty}, \quad \alpha_2 = \alpha_3 = \sqrt{\frac{1-\alpha_1^2}{2}}.$$

Таким образом, для магнитострикции при умеренных значениях намагниченности получается формула

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{111;111} = -\frac{2}{3}\varkappa_2\left(2\alpha_1\sqrt{\frac{1-\alpha_1^2}{2}} + \frac{1-\alpha_1^2}{2}\right),$$

причем

$$\alpha_1 = \frac{J}{J_\infty\sqrt{3}} + \sqrt{\frac{2}{3}\left[1 - \left(\frac{J}{J_\infty}\right)^2\right]}. \qquad (21)$$

В частности, в насыщении получается

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{111;111} = -\frac{2}{3}\varkappa_2 = -\lambda_1, \qquad \varkappa_2 = \frac{3}{2}\lambda_1, \qquad (22)$$

и, наконец,

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{111;111} = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leqslant J \leqslant \dfrac{J_\infty}{\sqrt{3}}, \\ -\lambda_1\left(2\alpha_1\sqrt{\dfrac{1-\alpha_1^2}{2}} + \dfrac{1-\alpha_1^2}{2}\right) & \text{при } \dfrac{J_\infty}{\sqrt{3}} \leqslant J \leqslant J_\infty. \end{cases} \qquad (23)$$

Эмпирическое значение λ_1 приблизительно равно $1{,}7 \cdot 10^{-5}$.

В заключение мы выполним соответствующие расчеты также для грани 110. При этом N_1 будет обозначать число областей, ориентированных вдоль двух прилегающих к грани 110 ребер, N_3 — число областей для точно противоположных направлений; N_2 — число областей для ребер, перпендикулярных грани 110. Простые вычисления, совершенно аналогичные расчетам по формулам (6)–(11), дают для $J \leqslant J_\infty/\sqrt{3}$ следующие результаты

$$N_1 N_3 = N_2^2, \qquad N_1 - N_3 = N\sqrt{2}\frac{J}{J_\infty} = N\sqrt{2}\delta, \tag{24}$$

$$x(x - \delta\sqrt{2}) = (1 - 2x + \delta\sqrt{2})^2, \qquad x = \frac{N_1}{N} = \frac{3\delta\sqrt{2}+4}{6} - \frac{1}{6}\sqrt{4-6\delta^2}, \tag{25}$$

$$\frac{N_2}{N} = -\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\sqrt{4-6\delta^2}, \qquad \frac{N_3}{N} = \frac{-3\delta\sqrt{2}+4}{6} - \frac{1}{6}\sqrt{4-6\delta^2}. \tag{26}$$

В соответствии с формулой (12) вклад в магнитострикцию, вносимый ориентированными перпендикулярно грани 110 областями, составляет $-(1/2)\lambda_0$, тогда как области, ориентированные по направлениям других ребер; дают вклад $+(1/4)\lambda_0$. В итоге для магнитострикции получается

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{110;110} = \frac{\lambda_0}{N}\left(\frac{N_1+N_3}{4} - \frac{N_2}{2}\right) = \frac{\lambda_0}{4}\left(2 - \sqrt{4 - 6\left(\frac{J}{J_\infty}\right)^2}\right). \tag{27}$$

При $J \geqslant J_\infty/\sqrt{2}$ элементарные области, направленные вдоль предпочтительных ребер, поворачиваются к грани 110. Вводя обозначение ε для косинуса угла между направлением этих областей и гранью 110, мы получаем (для областей, первоначально располагавшихся вдоль ребра 100)

$$\alpha_1 = \frac{\varepsilon + \sqrt{1-\varepsilon^2}}{\sqrt{2}}, \qquad \alpha_2 = \sqrt{1-\alpha_1^2}, \qquad \alpha_3 = 0.$$

Таким образом, по формуле (12) магнитострикция здесь принимает вид

$$\frac{\delta l}{l} = \lambda_0 - \frac{3}{4}\lambda_0 - \frac{3}{2}\lambda_1\alpha_1\alpha_2 = \frac{\lambda_0}{4} - \frac{3}{4}\lambda_1(2\varepsilon^2 - 1). \tag{28}$$

Наконец, учитывая, что $\varepsilon = J/J_\infty$, получаем

$$\left(\frac{\delta l}{l}\right)_{110;110} = \begin{cases} \dfrac{\lambda_0}{4}\left[2 - \sqrt{4 - 6\left(\dfrac{J}{J_\infty}\right)^2}\right] & \text{при } 0 \leqslant J \leqslant \dfrac{J_\infty}{\sqrt{2}}, \\[2ex] \dfrac{\lambda_0}{4} - \dfrac{3\lambda_1}{4}\left[2\left(\dfrac{J}{J_\infty}\right)^2 - 1\right] & \text{при } \dfrac{J_\infty}{\sqrt{2}} \leqslant J \leqslant J_\infty. \end{cases} \tag{29}$$

Кривые, получаемые из формул (19), (23) и (29), показаны на рис. 1 (при этом предполагалось, что $\lambda_0 = 1{,}95 \cdot 10^{-5}$, $\lambda_1 = 1{,}7 \cdot 10^{-5}$, а точками обозначены результаты измерений Вебстера[9]).

Сравнивая формулы для удлинения по различным кристаллографическим направлениям, мы видим, что предположение Акулова о «законе ферромагнитной анизотропии» для значений J ниже насыщения неверно, в чем также можно убедиться по результатам экспериментов Вебстера.

[9] *Webster W.* Proc. Roy. Soc. London, 1925, A **109**, 570.

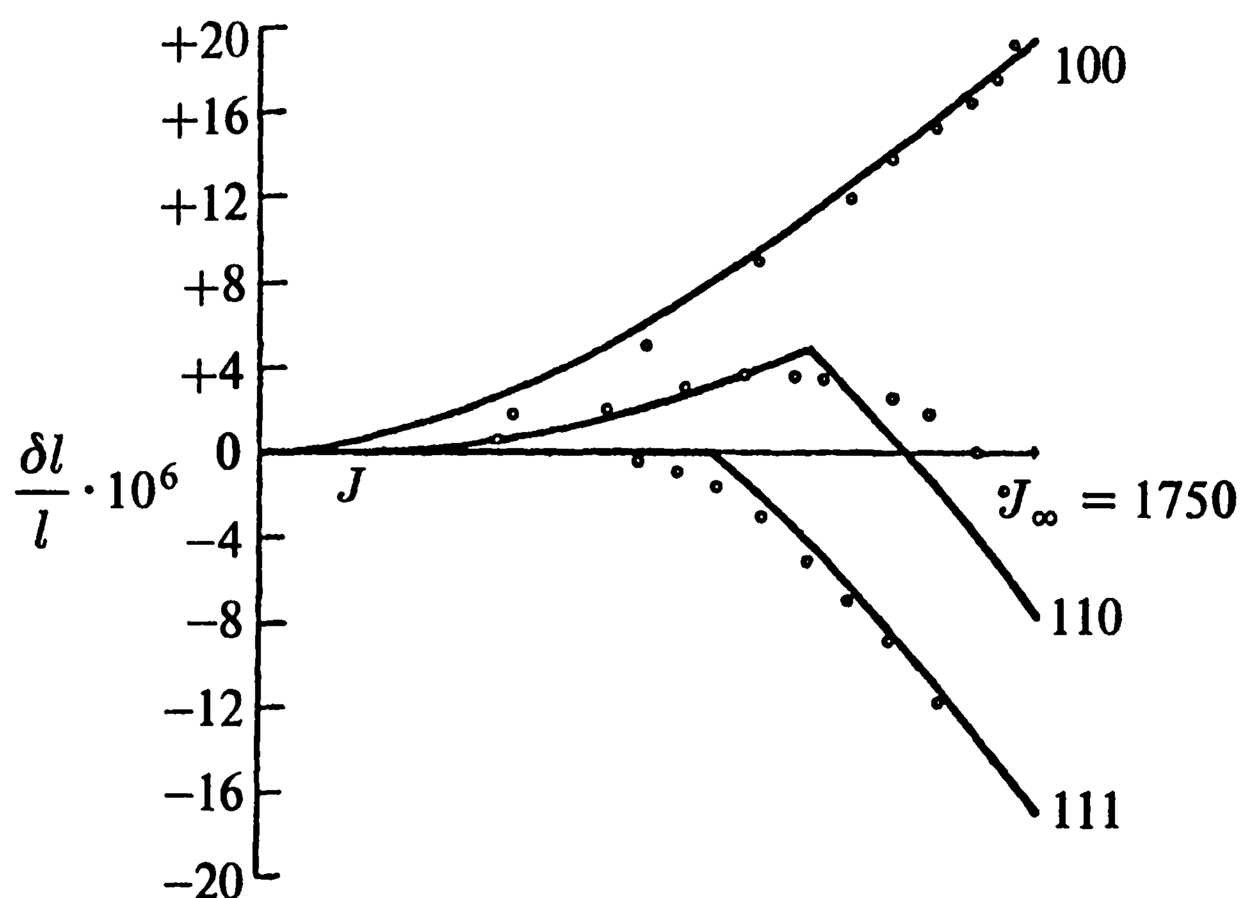


Рис. 1

§ 3

Еще одно интересное следствие из проведенных выше вычислений получается для упругих свойств монокристалла железа.

Поскольку магнитострикция железа в направлении 100 положительна, то растяжение кристалла по этому направлению приводит сначала лишь к тому, что элементарные области начинают устанавливаться вдоль растягивающей силы (частично параллельно, а частично антипараллельно), вследствие чего элементарные области, первоначально выстроенные по направлениям других ребер, будут переориентироваться по направлению растянутого ребра до тех пор, пока их магнитострикция не станет соответствовать величине растяжения. Этот процесс происходит почти без изменения энергии, и лишь свободная энергия должна при этом чуть возрастать вследствие уменьшения энтропии. Только в том случае, когда все элементарные области выстраиваются вдоль рассматриваемого направления 100, т. е. когда растяжение равно магнитострикции при насыщении в рассматриваемом направлении, при дальнейшем растяжении кристалла затраты энергии должны стать значительными, а именно — полностью соответствующими упругим силам. В течение всего процесса кристалл, разумеется, остается немагнитным, так как параллельно и антипараллельно растягивающей силе всегда направлено одинаковое число областей. Если мы нанесем на график зависимость удлинения кристалла при растяжении по направлению 100 от величины растягивающей силы, то кривая, следовательно, должна иметь отчетливый излом на том месте, где удлинение совпадает по величине с магнитострикцией в насыщении для направления 100. К сожалению, измерения упругих свойств монокристалла железа мне неизвестны.

§ 4

Основываясь на термодинамике, Беккер[10)] пришел к выводу, что магнитострикция намагниченной по оси никелевой проволоки при сильном растяжении должна быть в 1,5 раза больше, чем в недеформированном состоянии. Результат Беккера допускает следующее наглядное объяснение. Магнитострикция в никеле отрицательна. Поэтому при растяжении никелевой проволоки под действием большой силы все

[10)] *Becker R.* Zs. Phys., 1930, **64**, 660.

элементарные области выстраиваются перпендикулярно оси проволоки, причем растяжение проволоки до половинного значения магнитострикции в насыщении (см. уравнение (12)) происходит без изменения энергии, а дальнейшее растяжение требует изменения упругой энергии. Если теперь приложить сильное магнитное поле, выстраивающее все элементарные магниты параллельно оси, то проволока сначала сократится на половину величины магнитострикции в насыщении, потом сожмется на величину обычной магнитострикции, так что в целом получится полуторакратное значение обычной магнитострикции в насыщении. Ниже насыщения все явления становятся заметно сложнее, и мы не будем здесь на них останавливаться.

§5

В заключение мы кратко обсудим также изменения, испытываемые кривой намагничивания железа при растяжении, например, в направлении 100. Акулов[11] построил теорию гистерезисных потерь и кривых намагничивания, основываясь на предположении, что, например, кристаллы железа (или хотя бы их небольшие части) при сильном растяжении по направлению 100 могут становиться постоянными магнитами. Это предположение он оправдывает с помощью гипотезы, что магнитострикция кристалла железа не зависит от внешних напряжений; принимая эту гипотезу, мы действительно получаем результат Акулова чисто термодинамическим путем. Однако, как было показано выше, из обычных представлений об элементарных областях следует, что эта гипотеза неверна, и тем самым теория Акулова относительно гистерезиса лишается, по-видимому, своей основы. Простое рассуждение прямо показывает, что кристаллы железа при растяжении по направлению 100 не становятся постоянными магнитами. Ведь растяжение приводит лишь к тому, что все элементарные области выстраиваются как параллельно, так и антипараллельно направлению растяжения и притом поровну. Таким образом, кривые намагничивания при растяжении имеют точно такой же вид, как обычные кривые намагничивания в направлениях легчайшего намагничивания. Поэтому теория Акулова, несмотря на ее экспериментальные успехи, едва ли может претендовать на объяснение явлений гистерезиса.

Другое объяснение явлений гистерезиса ранее было предложено Беккером[12]. По Беккеру, внутренние напряжения, возникающие в ферромагнетике в результате обработки или загрязнений, препятствуют опрокидыванию элементарных областей. Пока эти напряжения заметно изменяются внутри областей, больших по сравнению с элементарными областями Блоха, из изложенных выше представлений следует, что элементарные области всегда опрокидываются или правильнее сказать: всегда могут уменьшаться и увеличиваться. Если же рассмотренные Беккером напряжения заметно изменяются уже внутри элементарной области, то такое заключение станет уже неправомерным, и не исключено, что для удовлетворительного объяснения гистерезиса потребуется более детальное обсуждение. Конечно, для этого понадобится подробное исследование, в частности, процессов, происходящих при увеличении элементарной области под влиянием внешнего магнитного поля.

(*Поступила 13 марта 1931 г.*)

[11] *Акулов Н.* Zs. Phys., 1930, **64**, 817.

[12] *Becker R.* Op. cit.

Часть IV

ТЕОРИЯ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

АБСОЛЮТНЫЕ РАЗМЕРЫ ВИХРЕВОЙ ДОРОЖКИ КАРМАНА*

В известной работе Карману[1] удалось вычислить сопротивление W плоской пластинки, движущейся в воде перпендикулярно своей плоскости со скоростью U, по данным, полученным непосредственно из картины движения.

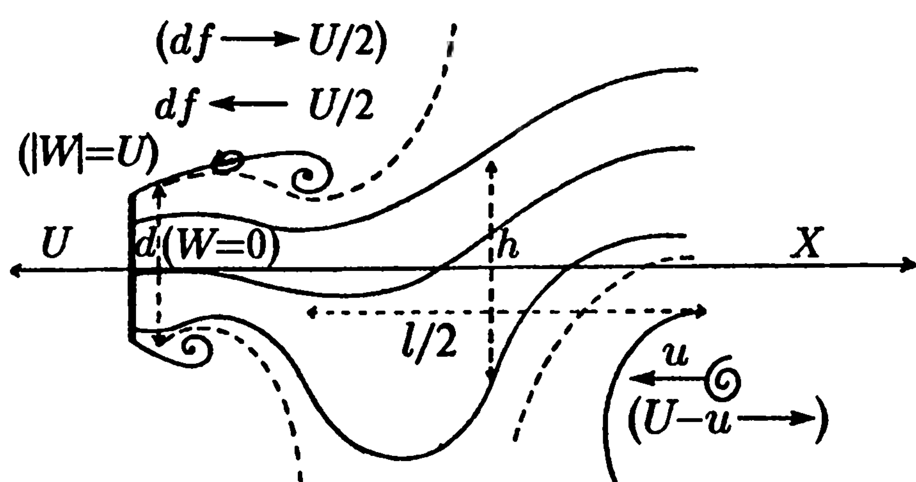


Рис. 1

Карман исследовал картину движения на некотором расстоянии позади пластинки. Эксперимент показал, что за пластинкой образуется упорядоченная система вихревых нитей — «вихревая дорожка», которая движется в воде с меньшей скоростью, чем пластинка. Относительные размеры этой системы вихрей, т. е. отношение расстояния l между вихрями к ширине h вихревой дорожки (рис. 1), были получены из анализа устойчивости, но, чтобы вычислить сопротивление W, скорость u и линейные размеры (например, расстояние l между двумя соседними вихрями) вихревой цепочки необходимо было определять экспериментально. Вопрос о том, существуют ли вихри в действительности, остался открытым.

По теореме Гельмгольца, в жидкости без трения никакие вихри возникнуть не могут. Отсюда, казалось бы, напрашивается вывод: образование системы вихрей должно быть обусловлено вязкостью. Карман[2] также счел необходимым для вычисления неизвестных u и l цепочки вихрей учесть процессы в пограничном слое пластинки. Однако, как следует из работы Озеена[3], влияние вязкости в непосредственной близи от пластинки меньше, чем на некотором расстоянии сзади от нее. Кроме того, Яффе[4] показал, что в общем случае вихрь не может возникнуть и в вязкой жидкости. Следовательно, причину возникновения вихрей в гидродинамике надлежит искать не в вязкости. Яффе предположил, что причину возникновения вихрей надлежит искать в разрывах внешних сил или скоростей жидкости. В нашем случае на пластинке действительно существуют такие разрывы. В настоящей работе предпринята попытка вывести из рассмотрения разрывов величины u и l, или u/U и l/d (d — толщина пластинки).

---

* Die absoluten Dimensionen der Karmanschen Wirbelbewegung. — Zs. Phys., 1922, **23**, 363–366. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Karman Th. von.* Göttingen Nachr., 1911, 509; 1912, 547; *Karman, Rubach.* Zs. Phys., 1912, **13**, 49.

[2] *Karman Th. von.* Op. cit.

[3] *Oseen B. C. W.* Ann. Phys., 1915, **46**, 231; **46**, 646.

[4] *Jaffe.* Zs. Phys., 1920, **21**, 541.

Из всех известных в настоящее время случаев обтекания водой плоской пластинки скорость течения не обращается в бесконечность на краю пластинки только[5] в потенциальном течении Гельмгольца—Кирхгоффа[6] (рис. 1).

Неоднократно установленная практическая неосуществимость этого течения, которое вследствие его поверхностей разрыва надлежит считать вихревым течением, обусловлена неустойчивостью возникающих вихревых слоев. Все же нельзя не высказать предположение о том, что разрывное потенциальное движение Гельмгольца—Кармана должно существовать по крайней мере в непосредственной близи от пластинки.

И действительно, на всех фотографиях видно, что реальная картина течения в непосредственной близи от пластинки обладает необычайно сильным сходством с потенциальным течением Кирхгоффа. Это наводит на мысль принять относительно возникновения вихревой дорожки Кармана следующее предположение (см. рис. 1)[7].

В непосредственной близи от пластинки сначала образуется разрывное потенциальное течение. На некотором расстоянии от пластинки поверхности разрыва, или вихревые слои, этого потенциального течения вследствие неустойчивости закручиваются и при достаточном увеличении расстояния от пластинки приводят к возникновению вихревой дорожки Кармана.

Принятое нами допущение представляет лишь приближение к действительности, так как возникающий на некотором расстоянии от пластинки вихрь не может не оказывать обратного воздействия на течение в непосредственной близости от пластинки. Кроме того, мы можем учитывать лишь переднюю сторону и края пластинки, так как в «мертвой» воде всякий раз возникает весьма хаотичное вихревое движение, не имеющее ничего общего с образованием правильной системы вихрей.

Сколь ни просто и правдоподобно принятое нами допущение, против него, как любезно сообщил нам проф. Прандтль (см. дополнение в конце статьи), можно выдвинуть кое-какие возражения. Проф. Карман выразил их следующим образом: «Если принятое допущение применить к случаю Бобылева симметричного клина, то при всех углах раствора оно приводит к одному и тому же коэффициенту сопротивления (такому же, как и для плоской пластинки)». Таким образом, остается открытым вопрос, почему именно в нашем случае принятое нами допущение столь хорошо согласуется с действительностью. Приводимые ниже вычисления показывают, что в случае пластинки принятое нами допущение позволяет достичь весьма хорошего согласия с экспериментом.

I

Условие на скорость системы вихрей

Для вычисления неизвестных u и l нетрудно вывести два уравнения. С одной стороны, из закона сохранения момента количества вихревого движения, который мы применим к двум закручивающимся вихревым слоям, следует, что момент количества движения вихря, образующийся в единицу времени на каждом из двух краев пластинки, должен быть равен моменту количества движения вихря, уносимому в единицу времени системой вихрей с одним или другим направлением вращения.

[5] Проф. Яффе любезно обратил мое внимание на то, что это утверждение не вполне правильно: Ричардсон (*Richardson A. R.* Phil. Mag., 1919, **38**, 433) привел другое математически очень интересное решение, хотя, насколько можно судить, оно и не имеет физического смысла.

[6] См., например, *Ламб Г.* Гидродинамика. М.: ГИТТЛ, 1947. Гл. 4, § 76.

[7] В картину течения на рис. 1 скорости ($w = u - iv$) входят отчасти двояким образом: величины в скобках относятся к скоростям относительно пластинки, а величины без скобок — к скоростям относительно жидкости на бесконечности.

28 Зак. 6

Нетрудно показать, что этот момент количества движения имеет величину

$$\frac{\zeta}{l}(U-u), \tag{1}$$

где ζ — момент количества движения одной вихревой нити. С другой стороны, чтобы вычислить момент количества движения вихря, образующийся на краю пластинки, заметим следующее. В разрывном потенциальном движении Гельмгольца скорость в «мертвой» воде за пластинкой (которая, по предположению, покоится) равна нулю, а на начинающейся на пластинке «свободной» поверхности скорость равна U. Следовательно, на поверхности разрыва скорость претерпевает скачок U (рис. 1). Разложим поверхность разрыва на элементы df, которые будем рассматривать как вихревые нити, и рассмотрим интеграл от скорости по замкнутому контуру вокруг какой-нибудь вихревой нити df (см. рис. 1). Мы обнаружим, что ее момент количества движения составляет $U\,df$. Заметим далее, что элемент df отнюдь не покоится относительно пластинки, поскольку в противном случае скорость в мертвой зоне была бы равна $-U/2$, а вне ее была бы равна $+U/2$. Элемент df удаляется от пластинки по поверхности разрыва со скоростью $U/2$. Отсюда мы заключаем: в единицу времени на краю пластинки возникает момент количества движения, равный

$$U\cdot\frac{U}{2}. \tag{2}$$

Приравнивая величины (1) и (2), получаем

$$U\cdot\frac{U}{2}=\frac{\zeta}{l}(U-u). \tag{3}$$

2

Условие на расстояние между вихрями

Второе уравнение следует из того, что существует определенное количество воды (см. рис. 2), переносимое между двумя цепочками вихрей. В то время как вне вихревой цепочки жидкость в среднем покоится (то есть частицы жидкости со временем не удаляются сколь угодно далеко от своего начального положения), внутри дорожки жидкость непрерывно течет вперед. Количество жидкости, переносимое этим течением, должно быть равно количеству жидкости, которое толкает вперед движущаяся пластинка, последнее же равно Ud.

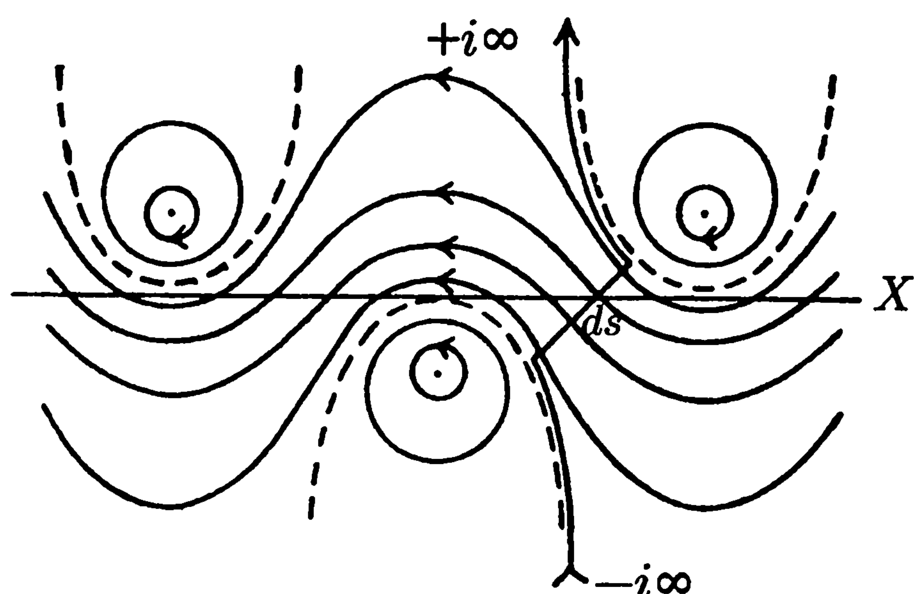


Рис. 2

Чтобы вычислить количество жидкости, переносимое течением, запишем, следуя Карману, комплексный потенциал вихревого течения:

$$\chi=\frac{i\zeta}{2\pi}\ln\frac{\sin(z_0-z)\frac{\pi}{l}}{\sin(z_0+z)\frac{\pi}{l}}, \tag{4}$$

где $z_0=\frac{l}{4}+\frac{hi}{2}$ (h — расстояние между двумя цепочками вихрей), $z=x+iy$ (ось x направлена, как на рис. 1, параллельно цепочкам вихрей и делит пополам расстояние между ними). Чтобы получить количество воды, увлекаемое системой

вихрей, проинтегрируем по любому пути линейный элемент ds (u — вектор скорости, $w = u - iv$, Im —«мнимая часть от ...»):

$$\int_a^b u_n\,ds = \int_a^b \operatorname{Im}(w dz) = \int_a^b \frac{d\chi}{dz}\,dz = \operatorname{Im}\chi\Big|_a^b.$$

Пределы a и b интеграла выбраны на линиях тока, ограничивающих переносимое количество жидкости (на рис. 2 эти линии показаны прерывистой линией), в остальном положение точек a и b на линиях тока произвольно. В нашем случае граничные линии тока — единственные, уходящие в бесконечность (в направлении оси Y, ортогональной оси X). Поэтому интеграл можно взять от $z = -i\infty$ до $z = +i\infty$. На рис. 2 путь интегрирования от $-i\infty$ огибает по прерывистой линии вихрь, затем пересекает русло течения и снова проходит по граничной линии тока до $+i\infty$. Таким образом, количество жидкости, переносимое течением в единицу времени, равно

$$\operatorname{Im}(\chi_{+i\infty} - \chi_{-i\infty}).$$

Подставляя χ из (4), получаем

$$\chi_{\alpha+\beta i} = \frac{i\zeta}{2\pi}\ln\frac{\exp\left\{i\frac{\pi}{l}\left(\frac{l}{4}+\frac{hi}{2}-\alpha-\beta i\right)\right\} - \exp\left\{-i\frac{\pi}{l}\left(\frac{l}{4}+\frac{hi}{2}-\alpha-\beta i\right)\right\}}{\exp\left\{i\frac{\pi}{l}\left(\frac{l}{4}+\frac{hi}{2}+\alpha+\beta i\right)\right\} - \exp\left\{-i\frac{\pi}{l}\left(\frac{l}{4}+\frac{hi}{2}+\alpha+\beta i\right)\right\}}.$$

Отсюда при $\beta \to \infty$, $\alpha = 0$ (α не входит в мнимую часть χ) находим

$$\chi_{+i\infty} = \frac{i\zeta}{2\pi}\ln\left(-\exp\left\{\frac{i\pi}{2} - \frac{h}{l}\pi\right\}\right) = -\frac{3\zeta}{4} - \frac{i\zeta h}{2l},$$
$$\chi_{-i\infty} = \frac{i\zeta}{2\pi}\ln\left(-\exp\left\{\frac{-i\pi}{2} - \frac{h}{l}\pi\right\}\right) = -\frac{\zeta}{4} + \frac{i\zeta h}{2l}.$$

Итак, количество жидкости, переносимое течением в единицу времени, равно (знак мы отбрасываем, так как нас интересует только абсолютная величина)

$$\left|\operatorname{Im}(\chi_{+i\infty} - \chi_{-i\infty})\right| = \frac{\zeta h}{l}. \tag{5}$$

Отсюда мы получаем второе уравнение:

$$Ud = \frac{\zeta h}{l}. \tag{6}$$

3

Заключение

Для численного решения уравнений (3) и (6) воспользуемся соотношениями

$$\frac{\zeta}{l\sqrt{8}} = u \tag{7}$$

и

$$\frac{h}{l} = 0{,}283\ldots, \tag{8}$$

выведенными Карманом[8]. Из уравнения (3) получаем:

$$\frac{1}{2}U^2 = u\sqrt{8}(U - u), \quad 1 = 2\sqrt{8}\frac{u}{U}\left(1 - \frac{u}{U}\right), \quad \frac{u}{U} = 0{,}299. \tag{9}$$

Другой корень $u/U = 0{,}771$ следует отбросить по причинам, которые сейчас станут ясными.

Соотношения (7) и (8) позволяют преобразовать уравнение (6) к виду

$$Ud = u\sqrt{8}l \cdot 0{,}283.$$

Учитывая (9), получаем

$$\frac{l}{d} = \frac{1}{\sqrt{8} \cdot 0{,}283 \cdot 0{,}229} = 5{,}45, \quad \frac{h}{d} = 1{,}54. \tag{10}$$

Другой корень u/U привел бы к гораздо меньшим значениям l/d и h/d. Но поскольку поверхности разрыва потенциального течения направлены во внешнюю сторону, то по вполне понятным причинам меньшие значения реализоваться не могут.

Карман[9] приводит следующие эмпирические значения:

$$u/U = 0{,}20; \quad l/d = 5{,}5.$$

Теоретические значения для u/U и l/d приводят к значению удельного коэффициента сопротивления ψ_w, задаваемого соотношением

$$W = \psi_w L d U^2 \rho$$

(L — длина пластинки в направлении, перпендикулярном плоскости чертежа; ρ — плотность жидкости), равному 0,90.

Это значение также великолепно согласуется с новейшими измерениями.

Замечания Л. Прандтля по поводу предыдущей работы

Гейзенберг упомянул о возражениях, высказанных мной по поводу некоторых пунктов его работы. Поскольку эти возражения могут оказаться небезынтересными для читателей, я кратко сформулирую их.

1. Сопротивление пластинки примерно вдвое больше сопротивления, вычисляемого по формуле Кирхгоффа. Скорости за пластинкой малы, а давление постоянно по объему вплоть до краев пластинки. Почти вдвое большему падению давления от середины передней стороны до края соответствует примерно вдвое большая величина $U^2/2$. Следовательно, вторичное образование вихрей необходимо принять равным $\alpha U^2/2$, где коэффициент α для плоской пластинки равен примерно 2 (точно учтено и влияние на образование вихрей движения на обратной стороне пластинки, но это влияние незначительно).

2. Не исключено, что значительная часть положительного и отрицательного момента количества движения при перемешивании в турбулентной зоне позади пластинки взаимно уничтожается и поэтому отсутствует в уносимой с пластинки

[8] *Karman Th. von.* Op. cit.
[9] Ibid.

системе вихрей. Если β — доля, приходящаяся на взаимно уничтожающуюся часть момента количества движения, то уравнение (3) следовало бы заменить уравнением

$$(1-\beta)\alpha\frac{U^2}{2} = \frac{\zeta}{l}(U-u).$$

3. Ниоткуда не следует и заключение о том, что количество жидкости, движущейся вперед между вихрями, равно Ud. Вместе с пластинкой в жидкости, которую мы считаем покоящейся, движется вперед и граница вихревой области, которая также должна быть заполнена жидкостью. При включении вихревой области в определение цепочки вихрей может возникнуть противодействие, что приведет к появлению в уравнении (6) неопределенного коэффициента, который может быть как больше, так и меньше единицы.

Весьма поучительные вычисления Гейзенберга пригодны по моему мнению лишь для того, чтобы вместе с экспериментальными данными служить своего рода ориентирами при оценке тех поправок, о которых я упоминал выше.

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ ЛАМИНАРНОГО ТЕЧЕНИЯ*

На протяжении довольно долгого времени устойчивость ламинарного течения была предметом бурных дискуссий. Ясности в существенных вопросах удалось достичь лишь недавно. В последнее время Линь[1] и Толлмин[2] опубликовали два обзора по проблеме устойчивости ламинарного течения. Эти обзоры и содержащиеся в них расчеты в значительной мере прояснили проблему, что избавляет меня от необходимости давать подробный обзор. Вместо этого я кратко остановлюсь на истории проблемы и сделаю несколько замечаний по поводу тех пунктов, которые, по моему мнению, нуждаются в дальнейшем уточнении. Вместе с тем, я хотел бы обсудить физическую интерпретацию математических результатов и сравнить их с физической интерпретацией статистической теории изотропной турбулентности.

I

Ограничимся, как обычно, двумерным течением между параллельными стенками: из работы Сквайра известно, что переход к трехмерным возмущениям не вносит в проблему существенных изменений. Обозначим первоначальное распределение скорости через $w(y)$, а возмущения скорости — через u и v, где

$$u = \frac{\partial\psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial\psi}{\partial x},$$

а

$$\psi(x, y) = \varphi(y)e^{i\alpha(x-ct)}.$$

Тогда, как показали Орр[3] и Зоммерфельд[4], справедливо уравнение

$$(w - c)(\varphi'' - \alpha^2\varphi) - w''\varphi = -\frac{i}{\alpha R}(\varphi'''' - 2\alpha^2\varphi'' + \alpha^4\varphi). \tag{1}$$

Это дифференциальное уравнение описывает задачу на собственные значения, аналогичную тем задачам, с которыми мы встречаемся в квантовой механике. Естественно поэтому в обоих случаях воспользоваться аналогичными методами решения. В этой связи я хотел бы упомянуть, что асимптотический метод[5],

---

* On the stability of laminar flow. Proc. Intern. Congress of Mathematicians. Cambridge (Mass.), USA, 1950, **2**, 292–296. — Providence, Rhode Island: Amer. Math. Soc., 1952. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Lin C. C.* Quart. Appl. Math., 1946, **3**, 117, 217–277.

[2] *Tollmien W.* Fiat Rewiew of German Science 1939–1946. Vol. 11. Hydro- and Aerodynamics. 1948. P. 21–53.

[3] *Orr W. M. F.* Proc. Roy. Irish Acad., 1906–1907, **27**, 9–26, 69.

[4] *Sommerfeld A.* Atti del IV Congr. Internaz. dei Matematici, Rome.

[5] *Heisenberg W.* Ann. Phys., 1924, **74**, 577.

давно применяемый для решения уравнения (1), по существу представляет собой не что иное, как метод, который впоследствии разработали в квантовой механике Вентцель, Крамерс и Бриллюэн.

Если нас интересует устойчивость при очень больших числах Рейнольдса, то естественно положить правую часть уравнения Орра—Зоммерфельда равной нулю и отбросить оба граничных условия. Жидкость при этом получает возможность скользить по стенкам, и мы приходим к уравнению, которым пользовался Рэлей:

$$(w-c)(\varphi''-\alpha^2\varphi)-w''\varphi=0. \tag{2}$$

Этого уравнения оказывается достаточно, чтобы установить неустойчивость во всех случаях, когда существуют затухающие или раскачивающиеся решения уравнения (2), так как уравнение (2) не имеет особой точки, в которой вязкость играла бы заметную роль. Следует также подчеркнуть (и в этом пункте я не могу полностью согласиться с математической формулировкой, предложенной Линем), что коль скоро существует затухающее решение уравнения (2), должно существовать и раскачивающееся решение с той же длиной волны, так как уравнение (2) инвариантно относительно изменения знака параметра α. Физически это означает, что в любой механической задаче, в которой вязкость несущественна, знак времени можно изменить на противоположный. Несущественна вязкость и для затухающих или раскачивающихся решений, так как силы инерции (левая часть уравнения (1)) в каждой точке значительно превосходят вязкость (правую часть уравнения (1)). Следовательно, каждому затухающему решению можно поставить в соответствие раскачивающееся решение, и каждый профиль такого типа неустойчив при очень больших числах Рейнольдса.

Тем не менее в действительности проблема все же возникает в связи с тем, что уравнение (2) допускает такие решения лишь при профилях скоростей весьма специального вида, а именно — при профилях с точкой перегиба ($w''=0$ при $y=y_0$). В 1880 г. лорд Рэлей доказал, что для таких профилей существуют раскачивающиеся решения. Пределы неустойчивости при конечных числах Рейнольдса, полученные из анализа полного уравнения (1), описываются кривой такого типа, как показано на рисунке из работы Толлмина[6].

2

Некоторые из наиболее важных профилей не имеют точек перегиба. При таких профилях скоростей с самого начала необходимо обращаться к полному уравнению (1). Обращение к уравнению (1) необходимо в любом случае, когда приходится рассматривать нейтральные возмущения, так как при вещественных c уравнение (2) содержит особую точку $w=c$, в которой вязкость становится существенной. Простейший профиль этого типа — течение Куэтта $w(y)=y$, при котором уравнение (2) не имеет решения, а Мизес[7] и Хопф[8] давно доказали, что уравнение (1) приводит только к затухающим колебаниям. Следовательно, устойчивость линейного профиля была известна давно. В этой связи необходимо подчеркнуть, что затухающее решение уравнения (1) в общем случае *не переходит* в решение уравнения (2) при $R\to\infty$, так как уравнение (2) в общем случае не имеет решений. Как показал Линь, между затухающими и раскачивающимися

[6] *Tollmien W.* NACA Technical Memoire, 1931, №609; 1936, №792; *Tollmien W.* Fiat Rewiew of German Science 1939–1946. Vol. 11. Hydro- and Aerodynamics. 1948. P. 21–53. *Lin C. C.* Op. cit.

[7] *Mises R. von.* Heinrich Weber Festschrift, 1912, 252.

[8] *Hopf L.* Ann. Phys., 1914, **44**, 1.

решениями уравнения (1) в отличие от аналогичных решений уравнения (2) имеется глубокое различие. В общем случае следует ожидать, что в пределе при $R \to \infty$ решение уравнения (1) не перейдет в решение уравнения (2), удовлетворяющее граничным условиям, но для каждого решения уравнения (2) существует решение уравнения (1), для которого решение уравнения (2) служит пределом при $R \to \infty$.

Следующий простейший профиль — течение Пуазейля между параллельными стенками.

$$w = 1 - y^2 \quad \text{(стенки совпадают с прямыми } y = \pm 1\text{)}.$$

При таком распределении скоростей уравнение (2) обладает решением, соответствующим несколько вырожденному нейтральному возмущению: $\varphi(y) = w$, $\alpha = c = 0$. Естественно попытаться выяснить, не перейдет ли при учете вязкости решение в раскачивающееся решение. При попытке решить эту задачу в 1924 г. методом асимптотического разложения[9] выяснилось, что действительно возникает неустойчивость. Выполненные недавно более точные расчеты Линя[10] подтверждают наш вывод. Область неустойчивости оказывается такой, как на рисунке из работы Линя[11] Обе ветви нейтральной кривой при очень больших R стремятся к $\alpha \to 0$, так как они имеют пределом решение $\varphi(y) = w$, $\alpha = c = 0$. (В работе 1924 г. лишь одна ветвь была вычислена, а другая лишь грубо оценена.)

Итак, насколько можно судить, вычисления приводят к весьма естественному результату: если решение (2) вообще допускает какое-то решение (раскачивающееся, затухающее или нейтральное), то при достаточно больших числах Рейнольдса профиль становится неустойчивым. Однако следует заметить, что не все проведенные в последнее время расчеты течения Пуазейля привели к такому выводу. Например, Пекерису[12], по-видимому, удалось получить устойчивость по крайней мере при очень малых значениях α; вычисления стоило бы продолжить, включив не только начальные, но и высшие гармоники.

Описанный результат, по-видимому, все сочли бы правдоподобным, если бы вскоре не появилась работа Нётера[13], в которой утверждалось, что кривая нейтрального возмущения не может существовать при любом непрерывном распределении скоростей. В своей работе Нётер использовал более тонкие и мощные математические методы, чем его предшественники, и вся ситуация стала весьма неясной. Затем, в 1929 г. Толлмин[14] рассмотрел вопрос об устойчивости для профилей типа пограничного слоя. Ему удалось получить неустойчивость при таких профилях и вычислить граничную нейтральную кривую. Позднее, в 1944 г., Толлмин[15], значительно улучшив математические методы, получил аналогичные результаты, а в 1947 г. Шубауэр и Скремстед[16] тщательными экспериментами доказали правильность расчетов неустойчивости, проведенных Толлмином.

Таким образом, в статью Нётера, поставившую в свое время под сомнение всю теорию неустойчивости, вкралась какая-то ошибка, которую до сих пор так и не удалось обнаружить.

---

[9] *Heisenberg W.* Op. cit.

[10] *Lin C. C.* Op. cit.

[11] Ibid.

[12] *Pekeris C. L.* Phys. Rev., 1948, **74**, 191.

[13] *Noether F.* Zs. angew. Math. Mech., 1926, **6**, 232, 339, 428, 497.

[14] *Tollmien W.* NACA Technical Memoire, 1931, no. 609; 1936, no. 792.

[15] *Tollmien W.* Fiat Rewiew of German Science 1939–1946. Vol. 11. Hydro- and Aerodynamics. 1948. P. 21–53.

[16] *Schubauer G. B., Skramstad H. K.* J. Aeron Sci., 1947, **14**, 69.

Относительно экспериментальной стороны проблемы следует заметить, что в любом конкретном эксперименте предел устойчивости может сильно отличаться от теоретического, поскольку всякий эксперимент вводит новые источники неустойчивости, не учитываемые элементарной теорией.

Например, как показал Тейлор[17], неустойчивость может быть вызвана первичной турбулентностью аэродинамической трубы, в которой проводится эксперимент. Причиной возникновения неустойчивости может быть любое возмущение течения на входе в область измерения. Тем не менее элементарная теория остается в силе.

3

Итак, если принять, что неустойчивость возникает всегда даже в тех случаях, когда уравнение с нулевой вязкостью допускает только нейтральное течение, то возникает вопрос, каким образом вязкость может порождать неустойчивость: из элементарных соображений можно было бы ожидать, что вязкость приводит скорее к затуханию, чем к раскачке колебаний. Не следует забывать, однако, что невязкая жидкость представляет собой систему с бесконечным числом степеней свободы, взаимодействующих обычно между собой таким образом, что энергия диссипирует по всем модам колебания. Лишь при весьма специальном выборе геометрии такое распределение энергии по всем степеням свободы не происходит. Следовательно, если в невязкой жидкости возможно нейтральное возмущение, то вязкость может легко изменить фазы энергии, приводящей к усилению (раскачке) колебаний.

Итак, весьма вероятно (хотя мы и не можем утверждать этого со всей определенностью), что усиление возмущения непосредственно приводит к полной турбулентности, т. е. к статистическому распределению энергии по всем степеням свободы. Наша оговорка связана с тем, что, как известно из работы Тейлора[18] по течению Куэтта между цилиндрами, иногда могут развиваться такие моды колебаний, которые правильнее было бы назвать течениями в ячейках. Их возникновение не имеет ничего общего с истинной турбулентностью и, по-видимому, является одним из частных проявлений действия центробежных сил. В большинстве же случаев неустойчивость непосредственно приводит к турбулентности. Такая турбулентность не обязательно будет изотропной, так как стенки приводят к отклонениям от изотропии, но характеризуется статистическим распределением энергии по очень большому числу степеней свободы.

Наконец, остается еще один вопрос: что произойдет с теми профилями скоростей, при которых уравнение с нулевой вязкостью (2) *не имеет* решения при очень больших числах Рейнольдса? Такие профили заведомо будут устойчивыми при очень больших числах Рейнольдса, если удастся исключить все внешние возмущения, например, на входе течения. Но при любом конечном возмущении следует ожидать, что найдется определенное число Рейнольдса, начиная с которого возмущения приведут к обмену энергией между различными степенями свободы и тем самым к возникновению турбулентности. Но доказать это математически пока никому не удалось.

---

[17] *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc. London, 1936, **A156**, 307.

[18] *Taylor G. I.* Proc. Roy. Soc. London, 1923, **A102**, 541.

27 Зак. 6

ОБ УСТОЙЧИВОСТИ И ТУРБУЛЕНТНОСТИ ТЕЧЕНИЙ ЖИДКОСТИ*

ВВЕДЕНИЕ

Проблема турбулентности, которая составляет предмет излагаемого ниже исследования, рассматривалась во множестве работ со столь различных точек зрения, что в наши намерения не входит давать во введении подробный обзор накопленных результатов. Вместо этого мы сошлемся на работу Нётера[1] о современном состоянии проблемы турбулентности, в которой приведена обширная библиография.

Для наших целей достаточно обрисовать современное состояние проблемы турбулентности в самых общих чертах. Все проведенные ранее исследования можно разделить на две части: одни из них посвящены изучению устойчивости какого-нибудь ламинарного движения, в других рассматривается сама турбулентность.

Работы первого направления сначала приводили к отрицательному результату: все исследованные ламинарные движения оказались устойчивыми. Фон Мизес[2] и Хопф[3], исходя из результатов Зоммерфельда[4], доказали устойчивость линейного профиля скоростей в течение Куэтта, Блюменталю[5] удалось получить аналогичный результат для кубического профиля, предложенного в порядке обсуждения Нётером. Позднее Нётер[6] обнаружил неустойчивый профиль. Правда, этот профиль неустойчив даже в случае невязкой жидкости и в действительности не реализуем ни при каком стационарном состоянии движения. Однако недавно Прандтль[7] доказал, что существует профиль скоростей, который становится неустойчивым лишь при учете вязкости.

Другая группа работ, достигшая в последнее время крупных успехов благодаря трудам[8] фон Кармана, Латцко и других, посвящена изучению самого турбулентного движения и проводится полуэмпирическим путем на основе законов подобия. Теоретическую основу всех этих работ составляет почти исключительно теория пограничного слоя Прандтля. Наиболее важным результатом работ этого направления мы считаем так называемый закон $y^{1/7}$ турбулентного распределения скоростей, являющийся следствием эмпирического закона сопротивления Блазиуса (ссылку см. в работе Шиллера[9]).

---

* Über Stabilität und Turbulenz von Flüssigkeitsströmen. — Ann. Phys., 1924, 4. Folge, **74**, 15, 577–627. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Noeter F.* Zs. angew. Math. Mech. 1921, **1**, 125.

[2] *Mises R. von.* Beitrag z. Oszillationsproblemen. Heinrich Weber — Festschrift. 1912. S. 252.

[3] *Hopf L.* Ann. Phys., 1914, **44**, 1.

[4] *Sommerfeld A.* Atti del. IV congr. intern. del. Mathem., Rom, 1909.

[5] *Blumenthal O.* Sitzungsber. bayr. Akad. Wiss., 1913, 563.

[6] *Noeter F.* Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 1917.

[7] *Prandtl L.* Zs. Phys., 1922, **23**, 19; *Tietjens O.* Dissert. Göttingen, 1912.

[8] Zs. angew. Math. Mech., 1921, **1**, 233.

[9] *Schiller L.* Rauhigkeit und kritische Zahl. Zs. Phys., 1920, **3**, 412.

Основная цель работ первого направления (исследований устойчивости) состоит в определении критического числа Рейнольдса. Удовлетворительного метода, позволяющего находить это число расчетным путем, до сих пор не существует, поэтому вопрос о том, удастся ли определить критическое число Рейнольдса, анализируя устойчивость, следует считать открытым. Попытки, предпринятые Экманом [10)], Руксом [11)] и Шиллером [12)], вместе с отрицательным результатом Хопера для линейного профиля скоростей наводят на мысль о том, что критическое число Рейнольдса указывает на ту точку, начиная с которой ламинарное движение становится неустойчивым, а момент, когда турбулентное движение впервые оказывается возможным как стационарное состояние. Таким образом, с точки зрения теории необходимо в зависимости от условий найти два критических числа Рейнольдса, первое из которых соответствует наступлению турбулентности, а второе — распаду ламинарного движения.

Настоящее исследование также распадается на две части: на рассмотрение проблемы устойчивости, с одной стороны, и на анализ турбулентного движения, с другой стороны.

Цель первой части состоит в том, чтобы с единой точки зрения дать критический обзор всех имеющихся работ, т. е. установить как можно более общие условия неустойчивости или устойчивости профиля скоростей, разработать методы решения уравнения устойчивости при произвольном профиле скоростей и определения критического числа Рейнольдса при неустойчивом профиле. Разумеется, применение приближенных методов позволяет находить критическое число Рейнольдса лишь с некоторой погрешностью. Тем не менее мы надеемся, что расчеты помогут нам качественно уяснить существенные вопросы. Изучение произвольного профиля скоростей на первый взгляд может показаться лишенным физического смысла, поскольку в действительности встречаются лишь профили вполне определенного типа. Однако поскольку произвольный профиль можно рассматривать как конечное возмущение другого профиля, как это делали, например, Нётер и другие исследователи, а в дальнейшем нам придется распространить результаты на априори неизвестный профиль скоростей турбулентного движения, то изучение произвольного профиля представляется нам весьма важным.

В качестве применения методов будут проведены вычисления для параболического профиля скоростей.

Во второй части мы попытаемся при некоторых сильно идеализированных предположениях вывести дифференциальные уравнения для турбулентных движений и получить из них качественные выводы относительно тех или иных свойств турбулентного распределения скоростей.

Часть I
УРАВНЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ

§ 1
Постановка математической задачи

Важнейшее ограничение, накладываемое на наши вычисления, состоит в том, что мы рассматриваем лишь плоские ламинарные движения и, следовательно, лишь плоские течения. Таким образом, при введении прямоугольной системы

[10)] *Ekman V.* Turbulent motion of liquids. Arch. math. och fysik, 1919, **6**, 12.

[11)] *Ruckes W.* Dissert. — Würzburg, 1910. См. также доклад Вина: «О турбулентном движении» (*Wien W.* Zs. Phys., 1904, 8; Verhandl. deutsch. Phys. Ges., 1907, 9).

[12)] *Schiller L.* Rauhigkeit und kritische Zahl. Zs. Phys., 1920, **3**, 412.

координат x, y, z мы исходим из допущения о том, что скорость в направлении оси z равна нулю, а все остальные величины не зависят от z. Кроме того, мы будем исследовать устойчивость только таких ламинарных движений, которые происходят между двумя прямыми параллельными стенками. При этом мы предполагаем, что стенки расположены параллельно оси x, в силу чего изучаемое ламинарное движение обладает ненулевой компонентой скорости только в направлении оси x. Эта составляющая скорости w в направлении оси x каким-то образом зависит от y. Относительно функции $w = w(y)$ мы в дальнейшем введем некоторые предположения (будем считать ее непрерывной, симметричной и т.д.). Во всем остальном эта функция сначала будет совершенно произвольной.

Если бы мы положили $w = ay$, то наш подход ничем не отличался бы от метода, которым Хопф исследовал течение Куэтта. Вопроса о том, реализуется ли рассматриваемый профиль $w = w(y)$ как стационарное движение, мы пока касаться не будем (см. с. 429).

Прежде чем выводить уравнение устойчивости (установленное еще Зоммерфельдом) из дифференциальных уравнений Стокса, введем, как обычно, безразмерные переменные. Пусть h — характерная длина (например, расстояние между стенками), U — характерная скорость выбранного профиля, μ — вязкость, ρ — плотность, $\frac{Uh\rho}{\mu} = R$ —число Рейнольдса. Введем вместо x, y, u, v, t, p (под u, v мы понимаем скорость в направлении осей x и y, t означает время, p — давление) новые переменные x_0, y_0, u_0, v_0, t_0 при помощи соотношений

$$x_0 = \frac{x}{h}, \quad y_0 = \frac{y}{h}, \quad u_0 = \frac{u}{U}, \quad v_0 = \frac{v}{U}, \quad t_0 = t\frac{U}{h}, \quad p_0 = p\frac{h}{\mu U}. \tag{1}$$

Если опустить индекс 0, то уравнения Стокса в новых переменных запишутся в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} &= \frac{1}{R}\left(-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} &= \frac{1}{R}\left(-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}\right). \end{aligned} \tag{2}$$

Поскольку мы предполагаем, что жидкость несжимаема, то

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \tag{3}$$

Исключая p, получаем, как известно, уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\Delta\psi + \frac{\partial \psi}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x}\Delta\psi - \frac{\partial \psi}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y}\Delta\psi = \frac{1}{R}\Delta\Delta\psi. \tag{4}$$

Под Δ мы понимаем здесь дифференциальный символ

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}.$$

Уравнение (4) не содержит ничего, что имело бы отношение к интересующей нас частной задаче — исследованию устойчивости определенного ламинарного течения. Именно поэтому уравнение (4) положено в основу всех вычислений в части II. Чтобы специализировать уравнение (4) и перейти к исследованию устойчивости,

разделим движение и тем самым векторный потенциал ψ на основное течение и наложенные на него малые возмущения, т. е. представим ψ в следующем виде:

$$\psi = \Phi(y) + \varphi(y)e^{i(\beta t-\alpha x)}, \tag{5}$$

$$\frac{\partial\Phi}{\partial y} = w(y) = w. \tag{6}$$

Подставляя (5) и (6) в уравнение (4) и отбрасывая все члены, не содержащие φ (поскольку мы считаем, что при $\varphi = 0$ уравнение (4) выполняется), и, кроме того, все члены, квадратичные по φ (поскольку возмущение φ предполагается малым), получаем для φ следующее дифференциальное уравнение:

$$(\varphi'' - \alpha^2\varphi)(w - \beta\alpha) - \varphi w'' = \frac{i}{\alpha R}(\varphi'''' - 2\alpha^2\varphi'' + \alpha^4\varphi). \tag{7}$$

Предположение о том, что уравнение (4) справедливо при $\varphi = 0$, физически означает следующее: мы рассматриваем лишь такие основные течения w, которые либо действительно стационарны под действием внешних сил, либо претерпевают медленные по сравнению с малыми возмущениями изменения во времени.

Уравнение (7) было выведено при указанных предположениях еще Нётером. Это — обыкновенное дифференциальное уравнение четвертого порядка для φ. Следовательно, функция φ должна удовлетворять четырем граничным условиям: u и v, а поэтому φ и φ' должны обращаться в нуль на обеих стенках. Если ввести параметр $\beta/\alpha = c$, так что c будет по существу означать скорость распространения возмущений, то математическую задачу можно сформулировать следующим образом: требуется исследовать решения уравнения

$$(\varphi'' - \alpha^2\varphi)(w - c) - \varphi w'' = \frac{i}{\alpha R}(\varphi'''' - 2\alpha^2\varphi'' + \alpha^4\varphi) \tag{7a}$$

при дополнительном условии: на ограничивающих стенках (например, при $y = 1$ и $y = -1$) φ и φ' должны обращаться в нуль. Для каждой пары значений α и R необходимо вычислить соответствующие значения c и β; параметр α для простоты считается строго положительным. В зависимости от того, какова мнимая часть β — положительна, равна нулю или отрицательна — мы имеем дело с устойчивым, незатухающим или неустойчивым возмущением. Требуется найти условия на профиль w, при которых уравнение (7a) допускает только устойчивые или только неустойчивые возмущения.

Прежде чем переходить к методам решения, необходимо отметить одно особое свойство уравнения (7a). В пределе невязкой жидкости $R = \infty$ уравнение (7a) вырождается в дифференциальное уравнение второго порядка для φ:

$$(\varphi'' - \alpha^2\varphi)(w - c) - \varphi w'' = 0. \tag{8}$$

Соответственно, при $R = \infty$ решение должно удовлетворять лишь двум граничным условиям, которые означают, что нормальные компоненты скорости, то есть v или φ, должны обращаться в нуль на обеих стенках, условие на φ' при $R = \infty$ не накладывается.

Условия разрешимости уравнения (8) были подробно исследованы еще Рэлеем[13]. Для упрощения терминологии можно различать «возмущаемые» и «невозмущаемые» основные течения в зависимости от того, обладает ли уравнение (8) решением с вещественным c, удовлетворяющим граничным условиям, или

[13] *Lord Rayleigh*. Paper, **1**, 361; **2**, 575, 594; **4**, 203.

не обладает[14]. Если существуют решения с комплексным c, то, как будет показано ниже, уравнение (8) позволяет решать вопрос об устойчивости возмущений даже при учете вязкости: возмущения в данном случае всегда *неустойчивы*.

Исходя из этого, мы приходим к предположению, что под влиянием вязкости профиль w допускает неустойчивые или незатухающие возмущения тогда и только тогда, когда он соответствует возмущаемым основным течениям.

В пользу принятого нами допущения свидетельствует то, что оно подтверждается на всех исследованных до сих пор профилях скоростей[15]. Однако обоснование это нельзя усматривать в том, что уравнение (8) получается из уравнения (7a) в пределе $R = \infty$, поскольку предельный переход к $R = \infty$ в дифференциальных уравнениях, как показано, например, в работах Озеена[16], во многих случаях приводил к неверным результатам, в особенности, если говорить о граничных условиях для невязкой жидкости. Поэтому этот предельный переход можно совершать лишь в интегралах уравнения (7a). Кроме того, характер изменений, вносимых введением вязкости в незатухающие возмущения из уравнения (8), априори непредсказуем: мы не можем заранее сказать, будут ли эти возмущения затухать или усиливаться.

Ниже мы попытаемся обосновать принятое допущение, показав, что при переходе через определенное значение числа Рейнольдса *возмущаемые* системы становятся *неустойчивыми*, а все *невозмущаемые* системы — *устойчивыми*.

Это утверждение позволяет значительно упростить проблему устойчивости профиля, поскольку при весьма малых значениях α решения уравнения (8), как известно, можно выписать в явном виде.

§2

Методы решения и общие свойства интегралов уравнения (7a)

Важнейшее свойство уравнения (7a), на котором основано приближенное представление его решений, состоит в том, что число Рейнольдса R можно считать очень большим. Действительно, как будет показано, если граница устойчивости существует, то в общем случае она лежит при очень больших значениях R. С другой стороны, поскольку физически совершенно невероятно, чтобы неустойчивость соответствующего профиля наступала вторично при малых значениях R, то для наших целей достаточно считать R очень большим.

Принятое нами допущение позволяет находить приближенные решения уравнения (7a) в виде разложений по отрицательным степеням R или, как будет показано, $\sqrt{\alpha R}$. Кроме того, мы будем предполагать, что α мало, и разлагать решения в ряд по положительным степеням α^2.

Два метода разложения (по степеням $(\alpha R)^{-1/2}$) и по степеням α^2) кажутся противоречащими друг другу, поскольку в первом случае параметр αR считается большим, а во втором параметр α^2 рассматривается как малый. Это противоречие устраняется тем, что число Рейнольдса R можно считать большим, а этого вполне достаточно для хорошей сходимости обоих разложений: например, при $R = 2\,000$, $\alpha = 1/10$, мы получаем $\alpha R = 200$, $\alpha^2 = 1/100$. Тем не менее, сходимость разложений по $(\alpha R)^{-1/2}$ и по α^2 заслуживает более подробного рассмотрения. Как показывает исследование, ряды по $(\alpha R)^{-1/2}$, как правило, расходятся, но носят характер асимптотических рядов, т. е. их члены сначала убывают, а затем возрастают, и наилучшее

---

[14] Заменять профиль скоростей ломаной из касательных *недопустимо*, поскольку результат был бы полностью искажен возможными возмущениями.

[15] См. *Prandtl L.* Op. cit.

[16] См. например, *Oseen B. C. W.* Beiträge zur Hydrodynamik. Ann. Phys., 1915, **46**, 231, 623.

приближение получается, если оборвать ряд на наименьшем члене. Итак, наши приближенные методы обладают такими же свойствами сходимости, как, например, ряды возмущений, используемые в астрономии, подробно исследованные Пуанкаре во втором томе «Новых методов небесной механики».

Применение асимптотических рядов наталкивается на значительную трудность, состоящую в следующем. В окрестности некоторых точек асимптотические ряды расходятся, и решить, каким образом должны быть связаны между собой приближенные решения, построенные по разные стороны от особой точки, чтобы они *стремились с двух сторон к одному и тому же* решению уравнения (7а), далеко не просто. Этот вопрос мы подробно рассмотрим в § 3.

Разложение по α^2 в общем случае, по-видимому, сходится. Для некоторых профилей специального вида (например, для линейного профиля) сходимость удается строго доказать. Вопрос о том, при каких условиях для профиля w разложение по степеням α^2 сходится, пока не рассматривался.

Начнем с вывода приближенных решений уравнения (7а):

$$(\varphi'' - \alpha^2\varphi)(w - c) - w''\varphi = \frac{i}{\alpha R}(\varphi'''' - 2\alpha^2\varphi'' + \alpha^4\varphi).$$

Для этого мы прежде всего положим

$$\varphi = \exp\left\{\int g\,dy\right\}, \quad g = \sqrt{\alpha R}g_0 + g_1 + \frac{1}{\sqrt{\alpha R}}g_2 + \ldots \,. \tag{9}$$

Ограничимся двумя старшими членами разложения по $\sqrt{\alpha R}$. Тогда

$$\alpha R g_0^2(w - c) + \sqrt{\alpha R}(g_0' + 2g_0g_1)(w - c) = i\alpha R g_0^4 + i\sqrt{\alpha R}\left(4g_0^3g_1 + 6g_0^2g_0'\right).$$

Предполагается, что α^2 и w'' по порядку величины сравнимы с единицей или по крайней мере много меньше $\sqrt{\alpha R}$. После несложных преобразований получаем:

$$g_0 = \sqrt{-i(w - c)}, \quad g_1 = -\frac{5}{2}\frac{g_0'}{g_0}, \int g_1 dy = -\frac{5}{2}\ln g_0. \tag{10}$$

Итак, мы нашли два частных решения уравнения (7а):

$$\varphi_{1,2} = (w - c)^{-5/4}\exp\left\{\pm\int_{y_0}^{y}\sqrt{-i\alpha R(w - c)}\,dy\right\}.$$

Точка y_0 определяется тем, что при $y = y_0$ должно выполняться равенство $w = c$. В некоторых случаях точка y_0 может быть комплексной. Знак корня следует выбрать так, чтобы при

$$w - c = -ae^{i\omega}, \; -i\alpha R(w - c) = \alpha R a e^{i(\omega + \pi/2)}$$

корень обращался в

$$(\alpha R a)^{1/2}e^{i(\omega/2 + \pi/2)}.$$

Заметим, что в обоих решениях величина α^2 в рассматриваемом приближении не входит в φ (например, α встречается только в комбинации αR, которую, как следует из уравнения (7а), можно в определенном смысле считать эффективным числом Рейнольдса).

Оба найденных нами решения (11), как будет показано ниже, определяют поведение возмущения φ в пограничном слое. Отсутствие в (11) величины α^2 физически означает, что мы рассматриваем только такие возмущения, длины волн которых велики по сравнению с толщиной пограничного слоя. В эмпирически наблюдаемых неустойчивых возмущениях длины волн заведомо удовлетворяют этому условию.

Чтобы построить полную систему уравнений (7а), нам необходимо найти еще два решения. Выберем те решения, которые получаются из решений уравнения (8) при разложении по степеням $(\alpha R)^{-1}$.

Для этого разложим сначала уравнение (8) по степеням α^2, т. е. взяв уравнение

$$(\varphi'' - \alpha^2\varphi)(w - c) - \varphi w'' = 0, \tag{11}$$

подставим в него

$$\varphi = \varphi^{(0)} + \alpha^2\varphi^{(1)} + \alpha^4\varphi^{(2)} + \dots\ . \tag{12}$$

Собирая члены при одинаковых степенях α^2, получаем

$$\begin{gathered}
\varphi^{(0)''}(w-c) - \varphi^{(0)}w'' = 0,\\
\varphi^{(1)''}(w-c) - \varphi^{(1)}w'' = \varphi^{(0)}(w-c),\\
\varphi^{(2)''}(w-c) - \varphi^{(2)}w'' = \varphi^{(1)}(w-c),\\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots
\end{gathered}$$

Два недостающих решения находим методом вариации постоянных:

$$\begin{aligned}
\varphi_3(R=\infty) &= (w-c)\left(1 + \alpha^2\int\frac{dy}{(w-c)^2}\int dy(w-c)^2 + \dots\right),\\
\varphi_4(R=\infty) &= (w-c)\int\frac{dy}{(w-c)^2}\left(1 + \alpha^2\int dy(w-c)^2\int\frac{dy}{(w-c)^2} + \dots\right).
\end{aligned} \tag{13}$$

Чтобы φ_3 и φ_4 удовлетворяли уравнению (7а), необходимо ввести поправочные члены порядка $(\alpha R)^{-1}$.

Не выписывая подробно соответствующее разложение, приведем лишь обе функции φ до величин порядка $(\alpha R)^{-1}$:

$$\begin{aligned}
\varphi_3 &= (w-c)\left[1 + \alpha^2\int\frac{dy}{(w-c)^2}\int dy(w-c)^2 + \alpha^4\dots + \right.\\
&\qquad\left. + \frac{i}{\alpha R}\int\frac{dy}{(w-c)^2}\frac{d^3}{dy^3}(w-c) + \dots\right],\\
\varphi_4 &= (w-c)\int\frac{dy}{(w-c)^2}\left[1 + \alpha^2\int dy(w-c)^2\int\frac{dy}{(w-c)^2} + \alpha^4\dots + \right.\\
&\qquad\left. + \frac{i}{\alpha R}\frac{d^3}{dy^3}(w-c)\int\frac{dy}{(w-c)^2} + \dots\right].
\end{aligned} \tag{14}$$

Объединяя (11) и (14), получаем полную систему приближенных уравнений (7а).

Прежде чем мы воспользуемся этими решениями, чтобы удовлетворить граничным условиям, целесообразно выяснить физический смысл четырех решений $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ и предвосхитить кое-какие результаты, обоснованием которых мы займемся в дальнейшем.

Решения φ_1 и φ_2 обладают тем свойством, что при интересующих нас больших значениях R изменяются весьма быстро — как экспоненты с показателем $\sqrt{\alpha R}$.

Например, если φ_1 принимает на стенке значения порядка 1, то на некотором расстоянии от стенки решение φ_1 экспоненциально убывает до нуля (оно могло бы и экспоненциально возрастать, если бы этому не препятствовали граничные условия). Отсюда следует, что, если не считать узкого слоя, непосредственно примыкающего к стенкам, функция φ состоит только из φ_3 и φ_4, т. е. возмущение φ ведет себя почти так же, как в невязкой жидкости.

То, что α^2 не входит явно в φ_1 и φ_2 (см. (11)), но фигурирует в разложениях φ_3 и φ_4, очевидно, имеет следующий физический смысл: если параметр α^2 не слишком велик ($\alpha^2 < \sqrt{\alpha R}$, см. уравнения (7а) и (9)), то длины волн можно считать бесконечно большими по сравнению с толщинами пограничных слоев, но не с шириной канала. Характерное различие между «погранслойными» решениями φ_1, φ_2 и «невязкими» решениями φ_3, φ_4 проявляется в наличии или отсутствии α^2.

Что касается сходимости разложения по степеням α^2, то, по-видимому, скорость ее достаточно велика и при α^2 порядка единицы, чтобы обеспечивать хорошее приближение, поскольку для линейного профиля ряды φ_3 и φ_4 переходят в ряды типа степенных разложений по $\cos\alpha$, быстро сходящиеся в окрестности $\alpha = 1$.

Картина течения, которую следует ожидать, исходя из приведенных выше соображений, соответствует допущениям, принятым Прандтлем в его теории пограничного слоя: всюду, за исключением узкой области, примыкающей к стенкам, движение весьма точно следует дифференциальным уравнениям невязкой жидкости. К самим стенкам прилипает пограничный слой толщиной порядка $(\alpha R)^{-1/2}$. Внутри пограничного слоя скорость u быстро падает до нуля по направлению к стенке, в то время как v мало отличается от нуля вне пограничного слоя.

§ 3

Подстановки для перехода через критическую точку

Если мы захотим проследить за ходом решения уравнения (7а) от одной стенки до другой, то необходимо иметь в виду, что в точке $y = y_0$ в канале $w - c = 0$ (или по крайней мере вещественная часть разности $w - c$ обращается в нуль) и, следовательно, скорость распространения возмущений совпадает со скоростью основного течения. В этой точке приближенные формулы (11) и (14) решений уравнения (7а) становятся неприменимыми.

Возникает необходимость построить подстановки для $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$, φ_4, позволяющие совершать переход от $\operatorname{Re}(w - c) > 0$ к $\operatorname{Re}(w - c) < 0$. Для этого мы разложим w и φ в окрестности критической точки по степеням $(\alpha R)^{-1/3}$ и положим $y - y_0 = \eta(\alpha R)^{-1/3}$. Предположим, что мнимая часть числа y_0 по порядку величины *меньше* $(\alpha R)^{-1/3}$. Если мнимая часть от y_0 по порядку величины больше $(\alpha R)^{-1/3}$, то подстановки, осуществляющие переход, тривиальны, так что во всей области вещественных y нет ни одной критической точки. Если мнимая часть от y_0 имеет тот же порядок, что и $(\alpha R)^{-1/3}$, то ход функций φ и w можно легко восстановить, интерполируя по двум перечисленным выше предельным случаям. Сначала мы можем положить даже $\operatorname{Im} y_0 = 0$, поскольку в рассматриваемом нами случае $\operatorname{Im} y_0 \leqslant (\alpha R)^{-1/3}$ функция φ допускает разложение по степеням $\operatorname{Im} y_0$ и нам понадобится лишь ход функции φ при $\operatorname{Im} y_0 = 0$.

Итак, полагая $\varphi = \varphi_0 + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2$, $w - c = \varepsilon a\eta + \varepsilon^2 b\eta^2 + \ldots$, где $\varepsilon = (\alpha R)^{-1/3}$, получаем из (7а):

$$\varphi_0'''' + \varepsilon\varphi_1'''' + \ldots = -i\left[(\varphi_0'' + \varphi_1'' + \ldots)\alpha\eta + \varepsilon\varphi_0'' b\eta^2 - 2\varepsilon\varphi_0 b\right] + \ldots .$$

Таким образом, в первом приближении должно выполняться уравнение

$$\varphi_0'''' = -i\varphi_0''\eta a, \tag{15}$$

а во втором приближении — уравнение

$$\varphi_1'''' = -i\left[\varphi_1''\eta a + \varphi_0''b\eta^2 - -2\varphi_0 b\right]. \tag{15a}$$

Относительно решений φ_1 и φ_2 из (11) мы заключаем из (15), что в критической области (где η по порядку величины сравнима с единицей) они ведут себя так же, как решения, найденные Хопфом при *линейном* профиле скоростей, т. е. как некоторые цилиндрические функции. Отсюда следует, что для φ_1 и φ_2 из (11) переходные подстановки с точностью до величин порядка $(\alpha R)^{-1/3}$ должны быть такими же, как при линейном профиле: подстановки

$$\varphi_1 \to \varphi_1 + i\varphi_2, \quad \varphi_1 - i\varphi_2 \to \varphi_1 \tag{16}$$

соответствуют переходу

$$\mathrm{Re}\,(w - c) < 0 \to \mathrm{Re}\,(w - c) > 0.$$

Для получения решений φ_3, φ_4 в окрестности $y - y_0 = 0$ тех несложных вычислений, которыми мы ограничивались до сих пор, оказывается недостаточно, поскольку в первом приближении (15) для φ_3 и φ_4 должно было бы выполняться равенство $\varphi'' = 0$, в то время как φ_4' в пределе при $R \to \infty$ логарифмически расходится в точке $y - y_0 = 0$. Таким образом, уравнения (15) и (15a) в том виде, как они записаны, непригодны для рассмотрения логарифмической особенности.

Поступим теперь иначе: положим $\alpha = 0$ и $w''' = 0$ (т. е. оборвем разложение w на втором члене), а затем проинтегрируем *точно* уравнение (7a). Заметим, что $\varphi = w - c$ должно быть частным решением получившегося упрощенного уравнения, и представим φ в виде, известном из теории линейных дифференциальных уравнений:

$$\varphi = (w - c)\int \psi\, dy.$$

Так как

$$\varphi'''' = -i\alpha R\big(\varphi''(w - c) - w''\varphi\big),$$

то для $\varphi = (w - c)\int \psi\, dy$ получаем уравнение

$$\psi'''(w - c) + 4\psi''w' + 6\psi'w'' = -i\alpha R\big(2w'(w - c)\psi + (w - c)^2\psi'\big),$$

которое после еще одного интегрирования переходит в уравнение

$$\psi''(w - c) + 3\psi'w' + 3\psi w'' = -i\alpha R\big((w - c)^2\psi - C\big), \tag{17}$$

где C — постоянная интегрирования. Если снова ввести

$$\eta = (y - y_0)(\alpha R)^{1/3}, \quad \varepsilon = (\alpha R)^{-1/3}, \quad w - c = \varepsilon a\,\eta + \varepsilon^2 b\eta^2, \quad \psi = \psi_0 + \varepsilon\psi_1 + \ldots,$$

то в новых переменных получится система уравнений

$$\begin{gathered} \psi_0''a\eta + 3\psi_0'a = -i(a^2\eta^2\psi_0 - C), \\ \psi_1''a\eta + 3\psi_1'a + \psi_0''b\eta^2 + 6\psi_0'b\eta + 6\psi_0 b = -i\big(2ab\psi_0\eta + a^2\eta^2\psi_1\big). \end{gathered} \tag{17a}$$

Эти дифференциальные уравнения содержат все решения уравнения (7а). Поскольку мы ставили перед собой узкую задачу — исследовать функцию φ_4 (φ_3 при $\alpha = 0$ регулярна в точке $y = y_0$), то нас интересует то решение уравнений (17а), которое на расстоянии порядка $(w - c)\alpha R$ от точки y_0 ведет себя как $1/(w-c)^2$: из разложений (14) видно, что в окрестности точки y_0 функция φ_4 ведет себя как

$$(w - c) \int \frac{dy}{(w - c)^2}.$$

Из уравнений (17а) получаем:

$$\psi_0 = \frac{C}{a^2\eta^2}$$

и

$$\psi_1''\eta + 3\psi_1' = -i\left(\frac{2b}{a^2}C\eta + a\eta^2\psi_1\right). \tag{18}$$

Функция ψ_1 полностью определяется тем, что на бесконечности она ведет себя как $-2bC/(a^3\eta)$.

Говоря о переходных подстановках для φ_4 и φ_3, мы имеем в виду следующее. В асимптотические представления (14) решений входит интеграл $\int \frac{dy}{(w-c)^2}$, теряющий смысл, если отрезок, по которому производится интегрирование, включает в себя точку $y = y_0$ ($w - c = 0$). Но в действительности в окрестности критической точки y_0 поведение функции φ_4 определяет не $\frac{1}{(w-c)^2}$, а функция ψ. Таким образом, все зависит от того, как ведет себя в окрестности критической точки y_0 (и в частности, ψ_1). Если это известно и, следовательно, мы знаем величину интеграла $\int \psi\, dy$ (взятого по отрезку, содержащему критическую точку), то тем самым известны и переходные подстановки для φ_3 и φ_4.

Решение ψ_1 уравнения (18) с граничным условием на бесконечности имеет следующий вид:

$$\psi_1(\eta) = -\frac{\pi bC}{3a^2\eta}\left\{H_{2/3}^{(1)}\left(\frac{2}{3}(-i\alpha_0\eta)^{3/2}\right)\int_{-\infty}^{\eta} H_{2/3}^{(2)}\eta^2 d\eta - H_{2/3}^{(2)}\int_{-\infty}^{\eta} H_{2/3}^{(1)}\eta^2 d\eta\right\}. \tag{19}$$

Оно содержит цилиндрические функции Ганкеля с индексом 2/3 и аргументом $2/3(-i\alpha_0\eta)^{3/2}$, где $\alpha_0 = a^{1/3}$. Знак выражения $(-i\alpha_0\eta)^{3/2}$ следует выбирать так, чтобы при $\eta = re^{\pi i/2}/\alpha_0$ оно было положительным. Более подробное исследование показывает, что если α_0 или a положительны, то на всей верхней полуплоскости и даже на части нижней полуплоскости, а именно при $\eta = re^{i\xi}$, где ξ заключено в пределах

$$-\frac{i\pi}{6} < \xi < \frac{7i\pi}{6},$$

функция ψ_1 ведет себя на бесконечности как $-2bC/(a^3\eta)$. Если параметр a отрицателен, то верхняя и нижняя полуплоскости меняются местами и

$$\lim_{r\to\infty} \psi_1\left(re^{i\xi}\right) = -\frac{2bC}{a^3\eta} \tag{20}$$

при $\frac{5i\pi}{6} < \xi < \frac{13i\pi}{6}$, $a < 0$, или $\frac{i\pi}{6} < \xi < \frac{7\pi i}{6}$, $a > 0$.

Отсюда следует важный вывод:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1 d\eta = \begin{cases} \dfrac{2bC}{a^3} i\pi, & a > 0; \\ -\dfrac{2bC}{a^3} i\pi, & a < 0. \end{cases} \tag{21}$$

Итак, переходные подстановки для φ_3 и φ_4 определены теперь с точностью до величин порядка $(\alpha R)^{-1/3}$ и для конечных значений α, поскольку теперь мы знаем (см. (21)), что следует понимать под интегралом $\int \frac{dy}{(w-c)^2}$, взятым от $w - c < 0$ до $w - c > 0$.

Формулы (16) *можно вывести из* (17) *еще одним способом.* Действительно, асимптотическим решениям (11) уравнения (7a) соответствуют решения

$$\frac{1}{\eta} H_{2/3}^{(1),(2)} \left(\frac{2}{3} (-i\alpha_0 \eta)^{3/2} \right) \tag{19a}$$

однородного уравнения (18) (при $C = 0$). Тем самым, задача о построении переходных подстановок для асимптотических решений (11) и (14) решена с требуемой точностью (до величины порядка $(\alpha R)^{-1/3}$).

§ 4
Выполнение граничных условий и устойчивость колебаний, соответствующих системе решений

Поскольку наше рассмотрение до сих пор совершенно не зависело от характера профиля скоростей (на профиль были наложены лишь ограничения, связанные с существованием особой точки), то, чтобы уменьшить чрезмерно большое число возможных вариантов, мы введем сейчас некоторые специальные предположения относительно природы основного течения. Следует заметить, что приводимые ниже рассуждения справедливы при гораздо более широких предположениях. Итак, предположим, что ограничивающие стенки заданы уравнениями $y = +1$ и $y = -1$, стенка $y = +1$ движется относительно другой стенки в положительном направлении вдоль оси x со скоростью порядка $w(+1) - w(-1)$, ламинарное течение прилипает к стенкам (как это наблюдается в течении Куэтта) и, наконец, в области $-1 < y < +1$, т. е. в канале, $\mathrm{Re}\,(w - c)$ обращается в нуль один и только один раз. Кроме того, мы будем считать функцию w и ее производные непрерывными во всей области и, исходя из этого, предполагать, что w, w', w'' и т. д. всегда имеют нормальную величину, т. е. ни в одной точке не достигают величины порядка $(\alpha R)^{1/2}$.

Кроме того, в приводимых ниже вычислениях мы будем считать величину α столь малой, а величину αR столь большой, чтобы с достаточной точностью можно было положить

$$\varphi_3 = w - c, \qquad \varphi_4 = (w - c) \int_{-1}^{y} \frac{dy}{(w - c)^2}. \tag{14a}$$

Фиксированный нижний предел интеграла в φ_4 не уменьшает общности наших решений. Функцию φ_4 мы задаем, требуя, чтобы линейная комбинация решений φ_3 и φ_4 обращалась в нуль при $y = -1$. Если на стенке $y = -1$ должна обращаться в нуль и разность $w - c$, то вместо φ_4 выступает функция $\varphi_3 = w - c$, которая будет принимать нулевое значение при $y = -1$.

Чтобы удовлетворить граничным условиям на стенке $y = -1$, составим из $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$, для которых при $y = -1$ выполняются равенства $\varphi = \varphi' = 0$, две комбинации f_1 и f_2:

$$f_1 = \varphi_4 + \frac{1}{g_0(-1)\left[w(-1) - c\right] - \frac{9}{4}w'(-1)}\left[\frac{\varphi_3}{w(-1) - c} - \frac{\varphi_1}{\varphi_1(-1)}\right],$$
$$f_1 = \varphi_4 - \frac{1}{g_0(-1)\left[w(-1) - c\right] + \frac{9}{4}w'(-1)}\left[\frac{\varphi_3}{w(-1) - c} - \frac{\varphi_1}{\varphi_1(-1)}\right]. \quad (22)$$

Под g_0 мы понимаем здесь и далее корень $\sqrt{-i\alpha R(w - c)}$, а не $\sqrt{-i(w - c)}$, как в (10), что позволяет нам не выписывать каждый раз множитель $\sqrt{\alpha R}$.

Чтобы удовлетворить граничным условиям на другой стенке, необходимо найти такие две постоянные A и B, для которых

$$Af_1(+1) + Bf_2(+1) = 0,$$
$$Af_1'(+1) + Bf_2'(+1) = 0.$$

Условие существования нетривиального решения этой системы линейных уравнений имеет вид

$$\begin{vmatrix} f_1(+1) & f_2(+1) \\ f_1'(+1) & f_2'(+1) \end{vmatrix} = 0. \quad (23)$$

Если R и α заданы, то условие (23) фиксирует значение c и β. Итак, необходимо разрешить соотношение (22) относительно c и определить знак мнимой части β. Соотношение (23) представляет собой полный аналог уравнения турбулентности Зоммерфельда для линейного профиля.

Из (16) получаем:

$$f_1(+1) = \varphi_4(+1) + \frac{1}{g_0(-1)\left[w(-1) - c\right] - \frac{9}{4}w'(-1)}\left[\frac{\varphi_3(+1)}{w(-1) - c} - \frac{\varphi_1(+1) + i\varphi_2(+1)}{\varphi_1(-1)}\right],$$
$$f_1'(+1) = \varphi_4'(+1) + \frac{1}{g_0(-1)\left[w(-1) - c\right] - \frac{9}{4}w'(-1)}\left[\frac{\varphi_3'(+1)}{w(-1) - c} - \frac{\varphi_1'(+1) + i\varphi_2'(+1)}{\varphi_1(-1)}\right],$$
$$f_2(+1) = \varphi_4(+1) - \frac{1}{g_0(-1)\left[w(-1) - c\right] + \frac{9}{4}w'(-1)}\left[\frac{\varphi_3(+1)}{w(-1) - c} - \frac{\varphi_2(+1)}{\varphi_2(-1)}\right],$$
$$f_2'(+1) = \varphi_4'(+1) - \frac{1}{g_0(-1)\left[w(-1) - c\right] - \frac{9}{4}w'(-1)}\left[\frac{\varphi_3'(+1)}{w(-1) - c} - \frac{\varphi_2'(+1)}{\varphi_2(-1)}\right]. \quad (24)$$

Эти значения f_1, f_2, f_1' и f_2' подставим в (23), оценив предварительно величину отдельных членов, чтобы не усложнять вычисления выписыванием лишних членов. Заметим, что в общем случае выполняется либо неравенство $\varphi_2(+1) \ll \varphi_2(-1)$, либо неравенство $\varphi_2(+1) \gg \varphi_1(-1)$. Какое из неравенств выполняется, зависит от множителя αR в экспоненте, входящей в решения φ_1 и φ_2 в (11), за исключением случая, когда выполняется строгое равенство

$$\mathrm{Re} \int_{y_0}^{-1} \sqrt{-i(w - c)}\, dy = \mathrm{Re} \int_{y_0}^{+1} \sqrt{-i(w - c)}\, dy,$$

который мы не рассматриваем.

Решить априори, какое из двух неравенств реализуется, невозможно. Оба неравенства имеют право на существование и порождают оба решения. Если профиль антисимметричен, то любое из неравенств порождает решения, симметричные тем, которые возникают при обратном неравенстве. В принципе, оба неравенства вполне аналогичны, поэтому достаточно рассмотреть лишь одно из них. Итак, предположим, что

$$\varphi_2(+1) \ll \varphi_2(-1),$$

т. е. (см. с. 431), что точка $w = c$ расположена ближе к точке $w = w(+1)$, чем к точке $w = w(-1)$.

Из нашего предположения следует, что значение $\varphi_1(-1) \sim \frac{1}{\varphi_2(-1)}$ чрезвычайно мало, а $\frac{1}{\varphi_1(-1)}$ чрезвычайно велико. В f_1 и f_1' в этом случае остаются лишь те члены, в которых φ_1 входит в знаменатель. В f_2 и f_2' члены, содержащие φ_2, выпадают.

Учитывая эти оценки, получаем из (23):

$$[\varphi_1(+1)+i\varphi_2(+1)]\cdot\left[\varphi_4'(+1)-\frac{\varphi_3'(+1)}{[g_0(-1)[w(-1)-c]+\frac{9}{4}w'(-1)]\,[w(-1)-c]}\right]=$$

$$=[\varphi_1'(+1)+i\varphi_2'(+1)]\cdot\left[\varphi_4(+1)-\frac{\varphi_3(+1)}{[g_0(-1)[w(-1)-c]+\frac{9}{4}w'(-1)]\,[w(-1)-c]}\right]. \qquad (25)$$

Даже в этом виде уравнение для c все еще весьма сложно. Дальнейшее упрощение уравнения (25) произойдет, если мы вычеркнем теперь не только величины порядка $e^{-\sqrt{\alpha R}}$, но и величины порядка $(\alpha R)^{-1/2}$.

Для этого мы прежде всего устанавливаем, что $g_0(+1)$ — величина порядка $(\alpha R)^{1/2}$ (и, следовательно, величина очень мала) и кроме того, что

$$\varphi_1'(+1)+i\varphi_2'(+1) = -\frac{5}{4}\frac{w'(+1)}{w(+1)-c}[\varphi_1(+1)+i\varphi_2(+1)] + g_0(+1)[\varphi_1(+1)-i\varphi_2(+1)].$$

Итак, из членов уравнения (25) мы удерживаем лишь те, которые содержат множитель $g_0(+1)$. В итоге мы приходим к простому результату:

$$[\varphi_1(+1)-i\varphi_2(+1)]\,\varphi_4(+1)=0,$$

или

$$\left|\exp\left\{2\int_{y_0}^{y=+1}\sqrt{-i\alpha R(w-c)}\,dy\right\}-i\right|\cdot\int_{-1}^{+1}\frac{dy}{(w-c)^2}=0. \qquad (26)$$

Это уравнение обладает двумя совершенно различными системами решений:

$$\text{I)}\ \exp\left\{2\int_{y_0}^{y=+1}\sqrt{-i\alpha R(w-c)}\,dy\right\}=i, \qquad \text{II)}\ \int_{-1}^{+1}\frac{dy}{(w-c)^2}=0.$$

Система I представляет собой полный аналог решений, полученных Хопфом для линейного профиля и подробно рассмотренных нами в § 4. Оказывается, что колебания, соответствующие системе 1, всегда устойчивы. Действительно, из

$$\exp\left\{2\int_{y_0}^{y=+1}\sqrt{-i\alpha R(w-c)}\,dy\right\}=i$$

следует, что

$$2\int\limits_{y_0}^{y=+1}\sqrt{-i\alpha R(w-c)}\,dy=\pi i\left(\frac{1}{2}+2n\right),\tag{27}$$

где n (см. с. 431) — целое положительное число. Нетрудно видеть, что это равенство выполняется лишь в том случае, если $\alpha c=\beta$ имеет положительную мнимую часть. Следовательно, колебания, описываемые равенством (27), затухают. Декремент затухания по порядку величины составляет $w(+1)=c$ и поэтому отнюдь не мал.

§ 5

Система решений II и условия неустойчивости профиля

Решения в системе II совпадают с решениями уравнения Рэлея (8) и удовлетворяют условию

$$\int\limits_{-1}^{+1}\frac{dy}{(w-c)^2}=0,\tag{28}$$

или (см. замечание по поводу соотношения (14) на с. 435) в совершенно общем виде

$$\varphi_4=(w-c)\int\limits^{y}\frac{dy}{(w-c)^2}=0\quad\text{при}\quad y=+1\ \text{ и }\ y=-1.$$

Последняя форма записи отличается от первой в некоторых исключительных случаях, которые мы рассмотрим ниже. Кроме того, уравнение (28) дает лишь первое приближение ($\alpha=0$). Что касается решений уравнения (28), то необходимо различать четыре случая.

1. Уравнение (28) обладает решениями с комплексным c. Профиль скоростей в этом случае всегда *неустойчив*, поскольку существует также решение уравнения (28) с комплексно-сопряженным значением $\bar{c}$.

2. Существуют решения уравнения (28) с *вещественным* c. Следуя Прандтлю, назовем такой профиль скоростей *возмущаемым*. Как видно из (21), возмущаемый профиль встречается только в том случае, если в точке $w=c$ выполняется равенство $w''=0$, т. е. если профиль либо имеет точку перегиба, либо кусочно-линейный.

3. Существуют *вещественные* значения c, обращающие в нуль по крайней мере *вещественную* часть интеграла

$$\int\limits_{-1}^{+1}\frac{dy}{(w-c)^2}.$$

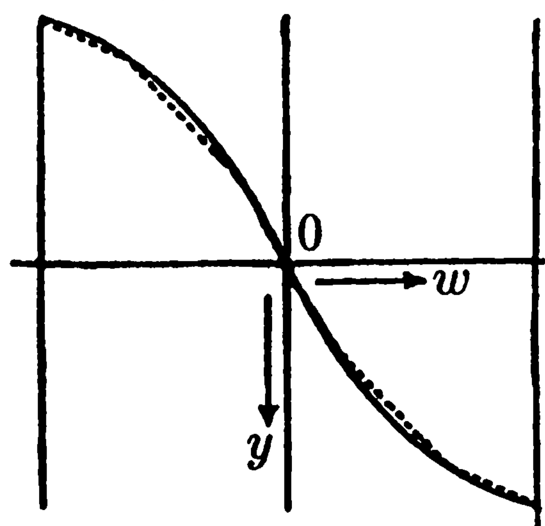
4. Если ни один из трех предыдущих случаев не реализуется, то уравнение (28) не имеет решений. В случаях 3 и 4 профиль называется *невозмущаемым*. Мы утверждаем, что профиль скоростей в случае 1 всегда неустойчив, в случаях 3 и 4 всегда *устойчив* и в случае 2 обычно неустойчив. Для случаев 1 и 4 наше утверждение уже доказано. В случае 3 положим $c=c_r+ic_i$, где c_r — вещественная часть того значения c, при котором обращается в нуль вещественная часть интеграла

$$\int\limits_{-1}^{+1}\frac{dy}{(w-c)^2}.$$

Тогда, как известно из § 3, при $c_i \leqslant 0$ мнимая часть этого интеграла равна $\frac{2b}{|a^3|}\pi i$, а при $c_i \gg |(\alpha R)^{-1/2}|$ принимает значение $-\frac{2b}{|a^3|}\pi i$. Из соображений непрерывности (см. § 3) мы заключаем, что существует точка с $c_i > 0$, в которой *мнимая* часть интеграла (28) обращается в нуль. Таким образом, в случае 3 четыре решения уравнения (28) порождают величину c с положительной мнимой частью, т. е. *устойчивые* колебания.

——— — Профиль

------- — Приближающая ломаная



× — Точки, в которых $c = w_{\text{излом}}$

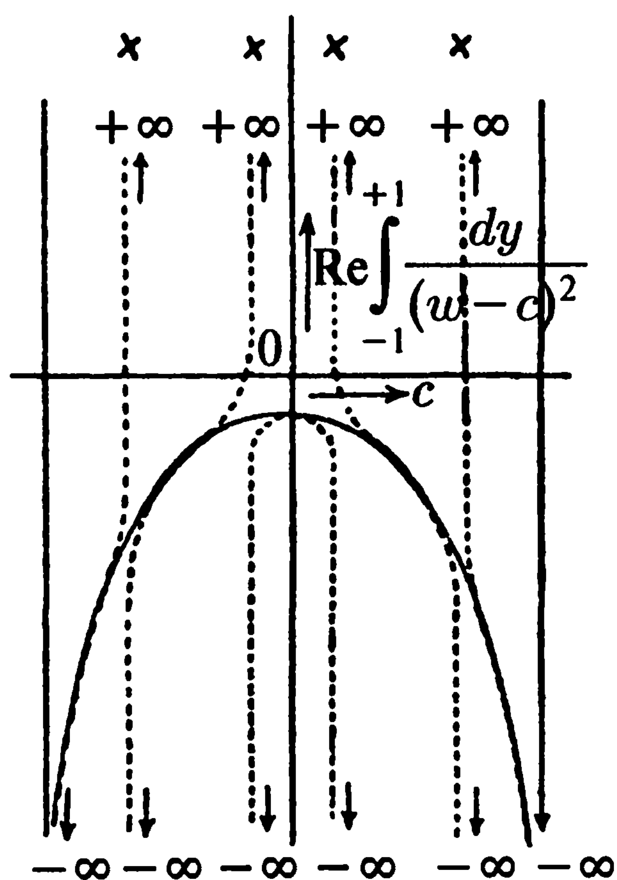


Рис. 1

Наконец, случай 2 требует несколько более подробных вычислений. Прежде чем приступить к ним, заметим, что в случае 2 имеются два типа решений уравнения (28), не представимых в виде

$$\int_{-1}^{+1} \frac{dy}{(w-c)^2}.$$

Действительно, если $w(+1) = w(-1)$, то решение уравнения (28) имеет вид $\varphi = w - w(+1)$, и $\varphi = 0$ при $y = +1, y = -1$. Кроме того, может случиться так, что при $w = w(+1)$, например, w' обращается в бесконечность. Тогда

$$\varphi = \left(w - w(+1)\right) \int_{-1}^{y} \frac{dy}{\left[w - w(+1)\right]^2}$$

— решение уравнения (8), удовлетворяющее граничным условиям. Мы останавливаться здесь на этом, поскольку все перечисленные случаи подробно рассмотрены в части II, не будем. Однако важно заметить, что различие между случаями 2 и 3 весьма велико и, например, недостаточно аппроксимировать *криволинейный профиль ломаной, как это делал Рэлей.*

Это различие становится особенно наглядным, если построить график

$$\operatorname{Re}\left(J(c)\right) = \operatorname{Re} \int_{-1}^{+1} \frac{dy}{(w-c)^2}$$

как функцию от c. На рис. 1 сплошной линией показана кривая, соответствующая криволинейному профилю, а пунктиром — кривая, соответствующая ломаной. Нетрудно видеть, что каждый излом аппроксимирующей ломаной порождает новый корень уравнения $\operatorname{Re}(J) = 0$, причем в окрестности точек $c = w_{\text{излом}}$ функция J ведет себя как $1/(c - w_{\text{излом}})$.

Это соответствует известной теореме Рэлея, согласно которой число нулей функции, описывающей возмущение, совпадает с числом изломов в профиле скоростей. Тем не менее криволинейному профилю соответствует возмущение, *не имеющее ни одного нуля.* После этого замечания вернемся к нашему утверждению о том, что при наличии вязкости возмущаемые профили, как правило, неустойчивы.

Для доказательства этой неустойчивости обратимся к уравнению (25) и к более точным решениям в системе II. Поскольку параметр c, как нам теперь известно, веществен вплоть до величин порядка $(\alpha R)^{-1/2}$, то можем предположить, что

$$\varphi_2(+1) \gg \varphi_1(+1).$$

Пренебрегая в (25) членами порядка $(\alpha R)^{-1/2}$, получаем после несложных преобразований

$$\int_{-1}^{+1} \frac{dy}{(w-c)^2} = \frac{1}{g_0(-1)[w(-1)-c]^2} - \frac{1}{g_0(+1)[w(+1)-c]^2}.$$

Пусть $c = c_0 + \delta$, где c_0 — нуль функции J, δ — малая величина порядка $(\alpha R)^{-1/2}$. Параметр α для простоты будем считать положительным. Тогда вместо c в правой части последнего уравнения можно подставить c_0, а левую часть разложить в ряд Тейлора по δ. Обрывая тейлоровское разложение на втором члене (по предположению, нам достаточно этого приближения), получаем

$$J(c) = J(c_0) + \delta \frac{dJ}{dc}\bigg|_{c=c_0},$$

а поскольку из уравнения (25) следует, что

$$J(c_0) = 0, \quad g_0 = \sqrt{-i\alpha R(w-c)}$$

(относительно выбора знаков см. с. 431), то

$$\delta \frac{dJ}{dc}\bigg|_{c=c_0} \sqrt{2\alpha R} = \frac{1-i}{[c_0 - w(-1)]^{5/2}} + \frac{1+i}{[w(+1)-c_0]^{5/2}}.$$

Так как $c_0 - w(-1) > w(+1) - c_0$ (точка c_0 должна быть расположена ближе к $w(+1)$, чем к $w(-1)$!), то мы заключаем отсюда, что мнимая часть δ, а значит, и c, и β, имеет такой же знак, как $\frac{dJ}{dc}\Big|_{c=c_0}$, и что возмущения, соответствующие отрицательным значениям $\frac{dJ}{dc}$, *неустойчивы*. Итак, если наш кусочно-линейный профиль обладает тем свойством, что $\frac{dJ}{dc} < 0$ в точке $w = c$, то он *неустойчив*. Условие $\frac{dJ}{dc} < 0$ выполняется весьма часто, например, всякий раз, когда точка $w = c$ лежит в окрестности одной стенки (например, $y = +1$), а профиль изменяется линейно от точки $w = c$ до границы.

Итак, подведем некоторые итоги.

Неустойчивость или устойчивость профиля во всех рассмотренных нами случаях удавалось определить по поведению профиля в невязкой жидкости. Профили, допускающие в случае невязкой жидкости незатухающие колебания с учетом вязкости при определенных предположениях становятся *неустойчивыми*. Как показано выше, профили последнего типа должны обладать совершенно особыми свойствами, например, быть *кусочно-линейными* или иметь точку перегиба $w'' = 0$ (см. выше).

Эти профили второго рода вместе с тем являются единственными, которые могут представлять физический интерес, поскольку только они обладают устойчивостью такого типа, который соответствует предположениям Рейнольдса. Как будет показано ниже, для этих профилей (за исключением кусочно-линейных) существует критическое число Рейнольдса.

§6

Число Рейнольдса, соответствующее границе устойчивости; численные расчеты для параболического профиля

Итак, если имеется профиль, допускающий в случае невязкой жидкости незатухающие колебания и теряющий устойчивость с появлением вязкости, то возникает вопрос: каково наименьшее число Рейнольдса, при котором наступает неустойчивость? Упрощенные уравнения (25), (26) и т. д. не позволяют ответить на этот вопрос. Чтобы получить ответ, необходимо вернуться к уравнению (23) и к решениям $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$, записанным в виде (11) и (14). Разумеется, для произвольного профиля w невозможно задать критическое число Рейнольдса как функцию от w и интегралов от w. Наша задача состоит лишь в том, чтобы указать способ, позволяющий находить критическую скорость, и провести все вычисления для одного частного примера.

Поскольку в наших последних расчетах параметры α и R входят лишь в комбинации αR (напомним, что параметр α^2 по предположению мал), то эти вычисления в лучшем случае позволяют получить критическое значение параметра αR, а не самого числа Рейнольдса R. Поэтому прежде всего необходимо изучить поведение нулей уравнения (23) при возрастании α^2. При этом из всех корней уравнения (23) нас интересуют лишь те, которые в системе решений II удовлетворяют уравнению $\varphi_4(+1) = 0$.

Итак, вместо условия (28) необходимо рассмотреть модифицированное условие

$$\varphi = (w-c)\int \frac{dy}{(w-c)^2}\left(1+\alpha^2\int dy(w-c)^2\int\frac{dy}{(w-c)^2}+\ldots\right), \qquad (28a)$$
$$\varphi = 0 \quad \text{при} \quad y=-1, \quad y=+1.$$

Если профиль, как у Рэлея, состоит из линейных участков, то каждому излому (см. с. 440) соответствует один корень уравнения (28а), причем эти корни существуют при любом значении α^2. Таким образом, кусочно-линейный профиль не приводит к максимальному значению параметра α^2, и, следовательно, не позволяет определить критическое значение числа Рейнольдса[17].

Иная ситуация складывается, если (см. с. 439) решение уравнения (28) или (28а) с вещественным c возможно потому, что либо в какой-нибудь точке профиля $w'' = 0$, либо $\varphi = w - w(+1)$ является решением уравнения (28) при $w(-1) = w(+1)$. Решения последнего типа всегда приводят к решениям уравнения (28а) с *вполне определенным значением* α^2. При $w(+1) = w(-1)$ существует лишь решение уравнения (28а) с $\alpha^2 = 0$.

Можно ожидать, что решения уравнения (28) или (28а), характеризуемые в пределе $R = \infty$ *одним вполне определенным значением параметра* α^2, при включении вязкости α не могут далеко отклоняться от «своих» значений α^2. Вполне понятно поэтому, что для профилей этого типа существуют *максимальные (минимальные* в случае, если $w'' = 0$) *значения параметра* α. Таким образом, все возмущения, длины волн которых меньше критических длин волн, в подобных случаях затухают при всех значениях αR.

После того, как установлена верхняя граница для α^2, попытаемся оценить хотя бы приближенно величину нижней границы для αR. Как показывает несложный анализ уравнения (25), значительные изменения в мнимой части параметра c

---

[17] Мы по-прежнему предполагаем, что R и αR велики и $\alpha \ll R$. Критические числа Рейнольдса могут встречаться и в том случае, если эти предположения не выполняются. Но тогда критические значения чисел Рейнольдса R столь малы, что заведомо не имеют физического смысла.

наблюдаются в том случае, когда в приближенных формулах (11) показатель экспоненты падает в $\varphi_1(+1)$ и $\varphi_2(+1)$ до величины порядка единицы. Как только это происходит, мы тотчас же достигаем, как будет показано на числовом примере, критического значения, при переходе через которое мнимая часть параметра c перестает быть отрицательной и становится положительной. Предположим, что в интервале от $w = c_0$ (c_0 — вещественная часть параметра c) до $w(+1)$ профиль w с достаточной степенью точности можно считать линейным. Тогда оценка параметра αR снизу определяется соотношением

$$\frac{(\alpha R)^{1/2}\left[w(+1) - c_0\right]^{3/2}}{w'(+1)} \sim 1, \tag{29}$$

или

$$(\alpha R)^{1/3} \sim \frac{w'(+1)^{2/3}}{w(+1) - c_0}. \tag{29a}$$

Поскольку разность $w(+1) - c_0$ в интересующих нас случаях мала, то (29) позволяет приближенно оценить большие критические числа Рейнольдса. Заметим также, что одному значению R *всегда* соответствует не только *максимальное*, но и *минимальное* значение параметра α неустойчивых колебаний. Это следует из того, что мы нашли минимальное значение параметра αR (а не числа Рейнольдса R).

В качестве численного примера приведенной выше схемы вычисления рассмотрим параболический профиль, представляющий наибольший интерес с точки зрения физики. Он принадлежит к классу возмущаемых профилей типа $w(+1) = w(-1)$.

Ограничимся рассмотрением плоского движения, т. е. не течения Пуазейля в трубах, а течения между двумя параллельными покоящимися стенками ($y = +1$, $y = -1$) под действием постоянного градиента давления. Итак, пусть

$$w = 1 - y^2. \tag{30}$$

Из симметрии w и $w - c$ мы заключаем, что возмущение φ должно быть четной функцией переменной y [18]. Таким образом, из множества решений уравнения (7а) мы выбираем два симметричных частных решения и пытаемся удовлетворить граничным условиям на какой-нибудь стенке, например, при $y = -1$. Граничные условия на другой стенке будут выполняться автоматически. В качестве одного симметричного решения можно взять φ_3, в качестве другого — функцию

$$\frac{\varphi_1(y)}{\varphi_1(0)} + \frac{\varphi_2(y)}{\varphi_2(0)}.$$

Как следует из оценки (29), c для нашего профиля в окрестности критической скорости — малая величина порядка $(\alpha R)^{-1/3}$, поэтому при вычислениях мы будем оставлять только члены первого порядка по c. Условимся также, что выполняется

---

[18] Если φ разложить на четную и нечетную (по y) составляющую, то вследствие симметрии разности $w-c$ и w каждая часть функции φ будет удовлетворять дифференциальному уравнению (7а) и краевым условиям. Поэтому при анализе устойчивости профиля $1 - y^2$ достаточно отдельно рассмотреть случаи «φ — четная функция от y» и «φ — нечетная функция от y» и только эти случаи. Нетрудно видеть, что предположение о симметричных возмущениях, т. е. о нечетной функции φ, не приводит ни какому решению уравнения (28) и, следовательно, не порождает неустойчивых возмущений. Таким образом, при рассмотрении устойчивых возмущений достаточно исходить из предположения о четной функции φ. Это замечание весьма важно, так как показывает, что все симметричные возмущения устойчивы, а все несимметричные возмущения неустойчивы.

неравенство $\varphi_2(0) \gg \varphi_1(0)$, вследствие чего в окрестности точек $w = 0$ и $w = c$ вторая симметричная функция φ сводится просто к $\varphi_1(y)$. Из (16) следует, что в этом случае мы можем удовлетворить граничным условиям при $y = -1$, имея в своем распоряжении два решения: φ_3 и $\varphi_1 - i\varphi_2$. Условие (23) перейдет в следующее:

$$\begin{vmatrix} \varphi_3(-1) & \varphi_1(-1) - i\varphi_2(-1) \\ \varphi_3'(-1) & \varphi_1'(-1) - i\varphi_2'(-1) \end{vmatrix} = 0. \tag{31}$$

Чтобы обеспечить симметрию функции φ_3, в качестве нижнего предела в интегралах, входящих в φ_3, следует выбирать $y = 0$. Кроме того, φ_3 необходимо разложить лишь до величины порядка α^4, а разложение по степеням $(\alpha R)^{-1}$ оборвать на членах порядка $(\alpha R)^{-1}$. Запишем условие (31) в виде

$$\frac{\varphi_1'(-1) - i\varphi_2'(-1)}{\varphi_1(-1) - i\varphi_2(-1)} = \frac{\varphi_3'(-1)}{\varphi_3(-1)}. \tag{32}$$

Подставляя (11) в (14), получаем:

$$\frac{\exp\left\{2\int\limits_{y_0}^{-1}\sqrt{-i\alpha R(w-c)}\,dy\right\} + i}{\exp\left\{2\int\limits_{y_0}^{-1}\sqrt{-i\alpha R(w-c)}\,dy\right\} - i}\sqrt{i\alpha Rc} =$$

$$= -\frac{9}{2c} + \frac{\frac{\alpha^2}{c^2}\left[\int\limits_0^{-1} dy(w-c)^2 + \alpha^2 \ldots + \frac{i}{\alpha R}\ldots\right]}{1 + \alpha^2 \int\limits_0^{-1}\frac{dy}{(w-c)^2}\int\limits_0^y dy(w-c)^2 + \ldots + \alpha^4 \ldots + \frac{i}{\alpha R}\ldots}. \tag{33}$$

Поскольку параметр c очень мал, то в первом приближении профиль w в интервале от 0 до c можно считать линейным: $w \sim 2(y+1)$. Тогда

$$\int\limits_{y_0}^{-1}\sqrt{c-w}\,dy = -\frac{1}{3}c^{3/2}. \tag{34}$$

Полагая $z = \frac{1}{3}c^{3/2}(2\alpha R)^{1/2}$, получаем из (33)

$$\frac{e^{-(1+i)z} + i}{e^{-(1+i)z} - i}\cdot\frac{3z(1+i)}{2} = -\frac{9}{2} + \frac{\alpha^2}{c}\frac{\int\limits_0^{-1} dy(w-c)^2 + \ldots}{1 + \alpha^2\int\ldots}. \tag{35}$$

Это уравнение полностью аналогично уравнению (26). Нас прежде всего интересует предельное значение R или z, при котором неустойчивые возмущения переходят в устойчивые, т. е. мнимая часть параметра c обращается *в нуль*. Предельное значение z, разумеется, зависит еще и от α. Поэтому мы будем считать параметр c *вещественным* и получим предельное значение z (или R) как функцию от α. Минимальное значение R функции $R(\alpha)$ можно назвать характеристическим числом Рейнольдса для параболического профиля. Как показывают вычисления, уравнение устойчивости в форме (35) содержит лишь верхнюю часть

кривой $R = R(\alpha)$ (см. рис. 2): из сказанного в § 6 следует ожидать, что нижнюю часть кривой $R = R(\alpha)$ мы сможем вычислить, выбрав для φ_1 и φ_2 приближения (см., например, (19a)), более точные, чем асимптотические разложения (11). Критическое число Рейнольдса указывает именно ту область, в которой асимптотические формулы становятся неприменимыми. Поскольку это обстоятельство привело бы к чрезмерному усложнению численных расчетов и мы не придаем сколько-нибудь существенного физического смысла рассматриваемому здесь типу неустойчивости, то для вычисления нижней части кривой $R = R(\alpha)$ (на рис. 2 она показана штриховой линией) достаточно воспользоваться грубыми оценками, не претендующими на количественное согласие с экспериментом. Что же касается качественных особенностей хода кривой, то они переданы достаточно верно. Кривая, изображенная на рис. 2, позволяет сделать следующие выводы.

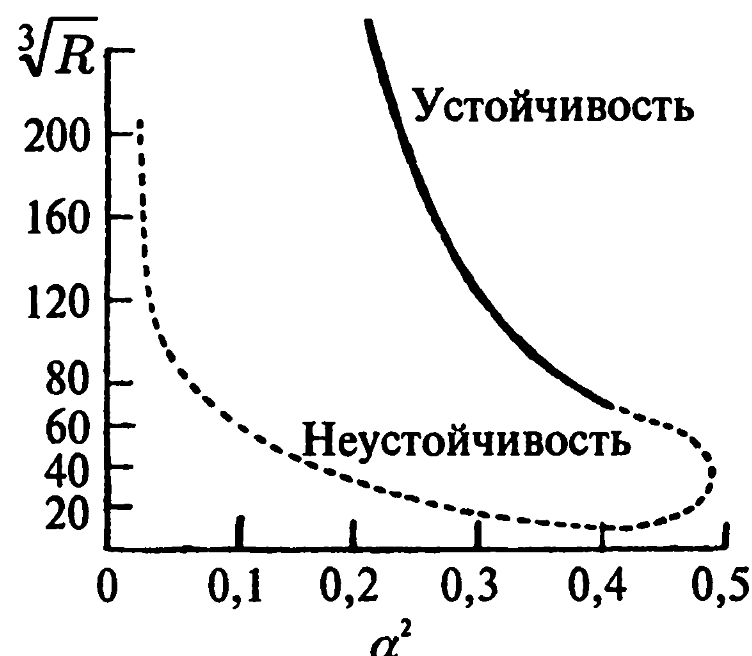


Рис. 2

1. Существует максимальное значение параметра α (и минимальное значение числа Рейнольдса R), при переходе через которое в сторону больших (меньших) значений неустойчивость сменяется устойчивостью.

2. При заданном значении числа Рейнольдса R существуют как максимальное, так и минимальное значения параметра α. При α, заключенных между минимальным и максимальным значениями, наблюдается неустойчивость; при значениях α, меньших минимального или больших максимального, наблюдается устойчивость.

3. Максимальное значение параметра α составляет около 0,7 ($\alpha^2 = 1/2$). Максимальное значение числа Рейнольдса R достигает величины порядка 10^3. Определить более точно это значение на рис. 2 невозможно.

§ 7
Физическая интерпретация результатов части I

Изложим подробно еще раз все результаты, полученные нами при решении проблемы устойчивости. Прежде всего в ходе вычислений было показано, что вопрос об устойчивости профиля для невязкой жидкости, как правило, удается решить по Рэлею, т. е. анализируя предельный случай невязкой жидкости (уравнение (8)). Профили, неустойчивые при $R = \infty$, как и следовало ожидать, остаются неустойчивыми и при достаточно больших конечных числах Рейнольдса R (§ 4). Профили, невозмущаемые в невязком случае, *устойчивы* (§ 4). Профили, допускающие (если их устойчивость исследовать при помощи уравнения (8)) *незатухающие* колебания, как правило, *неустойчивы*. Последний случай — единственный, дающий нечто новое с точки зрения физики по сравнению с гидродинамикой невязкой жидкости. Тем не менее необходимо подчеркнуть, что вопреки выводам, которые можно было бы сделать из работ Рэлея, этот случай является не общим, а *исключительным*. Если не считать соотношений $w(+1) = w(-1)$, $w'_{\text{граница}} = \infty$ (§ 5), то необходимое условие возникновения исключительного случая состоит в том, что в какой-то точке между стенками должно выполняться равенство $w'' = 0$. К числу исключительных профилей принадлежат, в частности, введенные Рэлеем ломаные, кусочно-линейные профили. Из этого, однако, можно сделать лишь один вывод: для исследования устойчивости плоских криволинейных профилей метод

Рэлея аппроксимации гладкого профиля ломаной непригоден (с. 440). Впрочем, как показывает исследование всюду искривленных ($w'' \neq 0$) профилей при помощи дифференциальных уравнений *с учетом вязкости* (§ 5), могут возникнуть возмущения, затухающие при любом значении параметра αR, но их вклад в декремент затухания в пределе при $R \to \infty$ стремится к нулю как $(\alpha R)^{-3/2}$, вследствие чего в том же пределе при $R \to \infty$ они переходят в незатухающие возмущения. При анализе устойчивости при помощи упрощенного дифференциального уравнения (8), не учитывающего вязких членов, мы *теряем* корни этих возмущений. Таким образом, данный случай не представляет собой исключения из правила, согласно которому, если уравнение (8), не учитывающее вязкость, допускает *незатухающие* возмущения, то при включении вязкости происходит возбуждение возмущений. Однако, как уже говорилось, возникновение незатухающих колебаний для уравнения (8) следует рассматривать как исключительный случай. Параболический профиль принадлежит к числу исключительных (§ 6). Если, исследуя неустойчивые профили, мы спросим, в каком диапазоне чисел Рейнольдса R наблюдается эта неустойчивость, то окажется, что к *критическим числам Рейнольдса обычно приводят лишь профили последнего типа, т. е. профили, допускающие в случае невязкой жидкости незатухающие колебания. Однако для ломаных профилей Рэлея критические числа Рейнольдса не существуют* (см. примечание 17 на с. 442): дело в том, что хотя для кусочно-линейных профилей минимальное значение параметра αR существует, мы не можем указать максимальное значение параметра α и, следовательно, минимальное значение числа Рейнольдса R для неустойчивости (§ 6). *Максимальное значение α и минимальное значение αR (а следовательно, и минимальное число Рейнольдса R) существует лишь для тех профилей рассматриваемого класса, для которых в случае невязкой жидкости к незатухающим колебаниям приводит лишь определенное значение α* (таковы, например, профили типа $w'' = 0$ при $w = c$), $w(+1) = w(-1)$. Таким образом, при определенном числе Рейнольдса R для этих профилей неустойчивым колебаниям соответствуют значения α от некоторого *минимального до максимального.* Все эти результаты согласуются с имеющимися в литературе исследованиями по устойчивости гидродинамических профилей[19]. Возникает вопрос, каким экспериментально наблюдаемым фактам соответствуют перечисленные выше математические результаты. Представляется весьма странным, что в экспериментально наблюдаемых течениях устойчивые профили (например, в течении Куэтта[20]) и неустойчивые профили (например, в течении Пуазейля) ведут себя совершенно одинаково. При сильных возмущениях, если числа Рейнольдса превышают некоторый предел, то возникает турбулентность. Если внешние возмущения поддерживать на как можно более низком уровне, то ламинарный профиль сохраняется при сколь угодно больших числах Рейнольдса. Последнее утверждение, подтвержденное для параболического профиля Экманом, кажется противоречащим теории для неустойчивых профилей. Однако, как нетрудно понять, в действительности никакого противоречия не возникает[21]. Действительно, чем меньше внешние возмущения, тем больше времени требуется, чтобы они оказали заметное воздействие на течение (в особенности, при больших числах Рейнольдса, так как порог устойчивости (§ 5) по порядку величины составляет

[19] См. работы, указанные во введении.

[20] См. также интересные исследования течения Куэтта при трехмерных возмущениях (*Taylor G. I.* Stability of a viscous liquid contained between two rotating cylinders. Phil. Trans. Roy. Soc. London, 1922, **223**, 289–343).

[21] На возможную интерпретацию эксперимента Экмана как влияния условий входа течения в трубу, мне указал проф. Прандтль. Пользуясь случаем, я хотел бы выразить ему искреннюю признательность за это замечание и многие другие ценные указания.

$(\alpha R)^{-1/2}$). Следовательно, при течении в трубах этот момент всегда столь отдален, что количество жидкости, устойчивостью которого мы интересуемся, успевает покинуть трубу задолго до того, как наступает неустойчивость. Таким образом, найденное нами из теоретических соображений число Рейнольдса подлежит экспериментальной проверке только на замкнутых трубах, по которым течет одно и то же количество жидкости[22]. С другой стороны, эксперименты Шиллера, показавшего, что при числах Рейнольдса ниже критического возможно только ламинарное течение, вообще не укладываются в рамки исследований устойчивости, поскольку в этих экспериментах ламинарное течение не выбиралось в качестве исходного, а речь шла лишь о существовании или несуществовании турбулентной формы течения. Во всяком случае приведенные выше соображения заставляют нас придти к выводу о том, что проблему турбулентности *не удастся решить*, рассматривая только устойчивость течений.

Тем не менее, проведенные исследования позволяют получить важные качественные результаты, относящиеся к главной цели нашей работы — расчету турбулентного движения. Рассматривая турбулентное движение как некоторое основное течение с наложенными на него *незатухающими* колебаниями, мы можем, опираясь на результаты наших расчетов, заключить, что минимальное число Рейнольдса R, при котором возможно турбулентное движение, по-видимому, также составляет около 10^3, длины волн незатухающих колебаний (при α порядка единицы) приближенно равны $2\pi h/2$ и при заданном числе Рейнольдса R параметр α изменяется в весьма узких пределах. Кроме того, эти колебания, как следует из малости разности $w(+1) - c$, сосредоточены в основном у стенок. Наши общие заключения носят качественный характер и совершенно не зависят от конкретного вида основного течения. Однако все проведенные до сих пор расчеты не выводят за рамки описанной выше качественной картины течения и ни на шаг не приближают нас к подлинному решению проблемы турбулентности.

Часть II

ТУРБУЛЕНТНОЕ ТЕЧЕНИЕ

§1

Постановка математической задачи

Числа Рейнольдса, которые обычно принято называть критическими, измеряемые, например, в экспериментах Шиллера и указывающие на возникновение при достаточно больших возмущениях турбулентности, не имеют прямого отношения к вопросам устойчивости и ламинарному течению. Эти числа являются характеристическими константами лишь *турбулентного* течения. Аналогичным образом, закон сопротивления Блазиуса и вытекающее из него известное следствие (скорость турбулентного течения у стенки возрастает как расстояние от стенки в степени 1/7) отчетливо показывают, что турбулентное движение обладает своими специфическими, четко выраженными закономерностями и представляет собой вторую возможную форму движения вязких жидкостей. Таким образом, для решения проблемы турбулентности необходимо попытаться устранить неопределенность, присущую турбулентному движению, и упростить его настолько,

---

[22] Нарушения устойчивости, которые Рукс наблюдал при очень малых числах Рейнольдса, по-видимому, обусловлены неустойчивостью, механизм которой рассмотрен в §7. Это предположение вполне правдоподобно, если критическое число Рейнольдса (см. часть II) лежит ниже того значения, при котором впервые становится возможной турбулентность (см. часть II).

чтобы для анализа турбулентного движения можно было применить уравнения Стокса.

Проблема турбулентности в гидродинамике — проблема энергетической, а не динамической устойчивости. Существуют две различные формы движения вязкой жидкости, каждая из которых обладает своим определенным диапазоном чисел Рейнольдса и может осуществляться в его пределах. Ламинарное течение возможно от $R = 0$ до $R = \infty$, однако при определенных условиях, когда число Рейнольдса превышает некоторый предел, ламинарное течение динамически неустойчиво. Наоборот, турбулентное движение существует, лишь начиная с определенного критического значения R, но энергетически всегда более устойчиво, чем ламинарное движение[23]. Поэтому при тех значениях R, при которых возможны обе формы движения, жидкость при помощи достаточно больших возмущений всегда можно перевести из ламинарного состояния в турбулентное состояние.

Чтобы приближенное математическое описание турбулентного движения стало возможным, рассмотрим снова течение между двумя параллельными стенками и примем следующие допущения[24]: а) течение симметрично относительно оси x (для этого ограничивающие течение стенки должны покоиться); б) течение периодично вдоль оси x с периодом $2\pi/\alpha$[25]; в) течение периодично по времени с периодом $2\pi/\beta$; г) все возмущения распространяются со скоростью β/α относительно оси x, т. е. при разложении движения в ряд Фурье в показатели экспоненты должны входить только величины, кратные $i(\beta t - \alpha x)$[26].

Разложение в ряд Фурье функции тока имеет следующий вид:

$$\psi = \varphi_0(y) + \varphi_1(y)e^{i(\beta t-\alpha x)} + \overline{\varphi_1(y)}e^{-i(\beta t-\alpha x)} + \varphi_2(y)e^{2i(\beta t-\alpha x)} + \dots \qquad (36)$$

Математическая задача состоит в вычислении нечетных (см. предположение а) функций $\varphi_0, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \dots$ ($\bar{\varphi}_1, \bar{\varphi}_2, \dots$ — функции, комплексно-сопряженные функциям $\varphi_1, \varphi_2, \dots$). Относительно сходимости ряда (36) априори ничего не известно. Вопрос о сходимости может быть решен лишь после того, как будут вычислены функции $\varphi_0, \varphi_1, \dots$. Если для достижения требуемой точности необходимо дойти до n-го приближения, т. е. вычислить $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$, то получается система из $n+1$ дифференциальных уравнений относительно $n+1$ неизвестных функций $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$. В последующем мы будем ограничиваться первым и вторым приближением. Итак, мы подставляем разложение (36) в уравнение (4), сравниваем коэффициенты при периодических функциях и обрываем разложение на члене $e^{2i(\beta t-\alpha x)}$, т. е. на φ_2, φ_2'. Функцию φ_0' обозначим через w (аналогичное обозначение было введено в (6) для Φ'). Мы получаем систему из трех дифференциальных уравнений (систему из трех комплексно-сопряженных дифференциальных

---

[23] См. *Noether F.* Zs. angew. Math. Mech. 1921, **1**, 125; Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 1917.

[24] Эти предположения, представляющие собой простое обобщение условий устойчивости Зоммерфельда, были применены к исследованию турбулентного течения Ф. Нётером, однако сколько-нибудь важные следствия из них извлечены не были (*Noether F.* Zur Theorie der Turbulenz, Jahresber. deutsch. Mathem. Vereins. 1914, **23**, 138).

[25] Предполагая, что α имеет определенное значение, мы исходим из результата, приведенного в части I: допустимые значения α заключены в определенных пределах, особенно узких в окрестности минимального числа Рейнольдса R.

[26] Вряд ли нужно подчеркивать, что истинное движение несравненно сложнее. Тем не менее, можно ожидать, что и принятые нами допущения позволят высказать относительно турбулентности некие утверждения качественного характера.

уравнений, которая возникает одновременно, выписывать не обязательно):

$$\begin{gathered}\frac{d^2}{dy^2}\Big((\varphi_1'\bar\varphi_1-\bar\varphi_1'\varphi_1)+2(\varphi_2'\bar\varphi_2-\bar\varphi_2'\varphi_2)\Big)=\frac{i}{\alpha R}w'',\\ (\varphi_1''-\alpha^2\varphi_1)\left(w-\frac{\beta}{\alpha}\right)-\varphi_1 w''-\varphi_2'(\varphi_1''-\alpha^2\bar\varphi_1)-2\varphi_2(\bar\varphi_1'''-\alpha^2\bar\varphi_1')+\\ +2\bar\varphi_1'(\varphi_2''-4\alpha^2\varphi_2)+\bar\varphi_1(\varphi_2'''-4\alpha^2\varphi_2')=\frac{i}{\alpha R}(\varphi_1''''-2\alpha^2\varphi_1''+\alpha^4\varphi_1),\\ (\varphi_2''-4\alpha^2\varphi_2)\left(w-\frac{\beta}{\alpha}\right)-w''\varphi_2+\frac{1}{2}(\varphi_1'\varphi_1''-\varphi_1\varphi_1''')=\frac{i}{2\alpha R}(\varphi_1''''-8\alpha^2\varphi_1''+16\alpha^4\varphi_2).\end{gathered} \tag{37}$$

Первое из этих уравнений допускает двукратное интегрирование и переходит в уравнение

$$\varphi_1'\bar\varphi_1-\bar\varphi_1'\varphi_1+2(\bar\varphi_2\varphi_2'-\bar\varphi_2'\varphi_2)=\frac{i}{\alpha R}(w'-C-C_1y), \tag{37a}$$

где C и C_1 — произвольные постоянные интегрирования.

По предположению а) левая часть уравнения (37а) и w нечетны по y, поэтому в нашем случае постоянная C должна быть равна нулю.

Если от второго приближения мы вернемся к первому приближению, то наша система уравнений сведется к системе двух дифференциальных уравнений для w и φ_1:

$$\begin{gathered}\varphi_1'\bar\varphi_1-\bar\varphi_1'\varphi_1=\frac{i}{\alpha R}(w'-C_1y),\\ (\varphi_1''-\alpha^2\varphi_1)\left(w-\frac{\beta}{\alpha}\right)-w''\varphi_1=\frac{i}{\alpha R}(\varphi_1''''--2\alpha^2\varphi_1''+\alpha^4\varphi_1).\end{gathered} \tag{38}$$

Выясним попутно, какие уравнения получаются вместо системы (38), если мы рассмотрим не течение, симметричное относительно оси x (требование а), т. е. не течение жидкости под действием перепада давления между двумя неподвижными стенками, а течение антисимметричное относительно оси x, т. е. течение без градиента давления между двумя стенками, движущимися относительно друг друга, как в случае течения Куэтта. Требования б) и в) в этом случае остаются в силе. Представление функции тока в виде ряда Фурье (36) становится недостаточным, поскольку φ_1, φ_2 и т. д. при произвольном отношении β/α уже не являются четными функциями. Чтобы сохранить нечетность всей картины течения в целом, необходимо включить в ряд Фурье для ψ симметричные колебания вида $e^{i(-\beta t-\alpha x)}$, т. е. разложение для ψ должно начинаться с членов

$$\varphi_0+\varphi_1(y)e^{i(-\beta t-\alpha x)}+\varphi_1(-y)e^{-i(-\beta t+\alpha x)}+\overline{\varphi_1(y)}e^{-i(-\beta t-\alpha x)}+\ldots\,.$$

Следовательно, в разложении функции тока ψ должны входить все члены вида $e^{i(m\beta t-n\alpha x)}$ (требование г) отпадает).

В результате мы получаем вместо (38) следующую систему уравнений:

$$\begin{gathered}\overline{\varphi_1(y)}\varphi_1(y)'-\overline{\varphi_1(y)'}\varphi_1(y)+\overline{\varphi_1(-y)}\varphi_1(-y)'-\overline{\varphi_1(-y)'}\varphi_1(-y)=\frac{i}{\alpha R}(w'-C),\\ (\varphi_1''-\alpha^2\varphi_1)\left(w-\frac{\beta}{\alpha}\right)-w''\varphi_1=\frac{i}{\alpha R}(\varphi_1''''-2\alpha^2\varphi_1''+\alpha^4\varphi_1).\end{gathered} \tag{39}$$

Оба уравнения систем (38) и (39) имеют простой и наглядный смысл.

Второе уравнение представляет собой не что иное, как рассмотренное нами ранее уравнение устойчивости (7), которое определяет амплитуду w колебания, наложенного на основное течение, и послужило основой наших исследований в части I. Что же касается первого уравнения, то оно выражает закон сохранения импульса. Левая часть этого уравнения по существу задает импульс, переносимый в среднем турбулентными вихрями[27], член с w' в правой части описывает ламинарный перенос импульса, постоянные C и $C_1 y$ соответствуют постоянным в законе сохранения импульса.

На стенках вследствие граничных условий выполняются равенства $\varphi_1 = \varphi_1' = 0$. Это означает, что величина w' на стенках совпадает либо с C, либо с $C_1 y_{\text{стенка}}$. Таким образом, на стенках ламинарный перенос импульса значительно превышает турбулентный перенос $w'_{\text{стенка}}$ (см. следующие параграфы). Но в центральной части канала, т. е. во всем канале за исключением узких областей, примыкающих к его стенкам, w' имеет величину порядка 1, и следовательно, очень мала по сравнению с C или $C_1 y$. Это означает, что вдали от стенок турбулентный перенос импульса полностью подавляет ламинарный перенос.

Структура системы уравнений (38) и (39) позволяет сразу же выписать их тривиальное решение

$$\varphi_1 = 0, \quad w' = C \text{ (или } w' = C_1 y),$$

возвращающее нас к ламинарному течению.

Наша цель состоит теперь в том, чтобы изучить нетривиальные решения систем дифференциальных уравнений (38) и (39).

§ 2

Турбулентное движение у стенок и закон сопротивления

Важнейший результат относительно поведения w в непосредственной близости от стенки принадлежит Карману, который, исходя из соображений размерности, вывел из закона сопротивления Блазиуса, что в окрестности стенки w возрастает как $\eta^{1/7}$ (η — расстояние от стенки). Мы кратко воспроизведем ход рассуждений Кармана, чтобы дать общее представление о том, чего следует ожидать от поведения w вблизи стенок, даже если закон Блазиуса неизвестен.

Касательное напряжение на стенке (т. е. сопротивление), как нетрудно видеть из соображений размерности, представимо в виде

$$\tau = \varkappa\mu\frac{U}{h}f(R),$$

где $\varkappa$ — некоторая безразмерная постоянная.

В частности, если принять степенной закон, то

$$\tau = \varkappa\mu\frac{U}{h}R^{\xi} = \varkappa\mu\frac{U}{h}\left(\frac{Uh\rho}{\mu}\right)^{\xi}. \tag{40}$$

[27] Под этим мы понимаем средний импульс в направлении оси x, переносимый в нашей задаче вдоль оси y. Импульс в направлении оси x по существу равен u; скорость частиц, осуществляющих перенос импульса вдоль оси y, равна v. Следовательно, в единицу времени они переносят импульс $u \cdot v$, а в среднем — импульс $\overline{u \cdot v}$, что в случае (36) оказывается равным

$$\overline{u \cdot v} = -i\alpha(\overline{\varphi}_1\varphi_1' - \overline{\varphi}_1'\varphi_1).$$

Решая (40) относительно U, получаем

$$U = \left[\frac{\tau}{\varkappa}\left(\frac{h}{\mu}\right)^{1-\xi}\rho^{-\xi}\right]^{1/(1+\xi)}.$$

Следовательно, распределение скоростей вблизи стенки должно описываться выражением вида

$$w = \frac{1}{U}\left[\tau\rho^{-\xi}\left(\frac{h}{\mu}\right)^{1-\xi}\right]^{1/(1+\xi)} f\left(\frac{\eta}{h}\right)$$

(w здесь снова (см. (1) и (6)) выбрано безразмерным и поэтому содержит U в знаменателе, η означает расстояние от стенки).

Предположим, что в первом приближении закон распределения скоростей имеет степенной характер (σ — безразмерная постоянная):

$$w = \frac{\sigma}{U}\left[\tau\rho^{-\xi}\left(\frac{h}{\mu}\right)^{1-\xi}\right]^{1/(1+\xi)} \left(\frac{\eta}{h}\right)^{\varepsilon}.$$

Если потребовать, чтобы в непосредственной близости от стенки распределение скоростей зависело только от τ, ρ, μ и не зависело от h (физически такое допущение весьма правдоподобно), то

$$\frac{1-\xi}{1+\xi} = \varepsilon. \tag{41}$$

При $\xi = \frac{3}{4}$ мы получаем $\varepsilon = \frac{1}{7}$, что соответствует закону Блазиуса.

Чтобы пояснить физический смысл этого результата, заметим следующее. Закон $w \sim \eta^{1/7}$ означает, что $w' = dw/d\eta$ на стенке обращается в бесконечность, т. е. w бесконечно «прижимается» к стенке. Вместе с тем ясно, что в действительности w' не может обращаться в бесконечность на стенке, поскольку именно производная w' по существу имеет смысл касательного напряжения на стенке и поэтому в силу соотношения (40) ее с точностью до численного множителя, не зависящего от R, можно положить равной R^{ξ}:

$$w'_{\text{стенка}} \sim R^{\xi}. \tag{42}$$

Таким образом, при интересующих нас числах Рейнольдса R производная на стенке очень велика. Распределение скоростей $w \sim \eta^{1/7}$, как следует из соображений, использованных при его выводе, строго выполняется лишь в предельном случае при бесконечно большом расстоянии от стенки или для невязкой жидкости ($R = \infty$). Суть дела станет яснее, если зависимость $w \sim \eta^{1/7}$ представить в виде $\eta = w^7$. Поскольку касательное напряжение на стенке бесконечно, мы заключаем, что разложение функции $\eta(w)$ в степенной ряд должно начинаться с члена вида $\gamma_1 w$. Но этот член очень мал: по существу он равен величине, обратной w', т. е. имеет порядок $R^{-\xi}$ (см. (42)).

Таким образом, выведенную зависимость $w \sim \eta^{1/7}$ надлежит понимать следующим образом: разложение функции $\eta(w)$ в степенной ряд должно начинаться с членов

$$\eta = \gamma_1 w + \gamma_7 w^7 + \dots, \tag{43}$$

причем коэффициент γ_1 очень мал и поэтому при достаточно больших значениях w первым членом $\gamma_1 w$ можно пренебречь по сравнению со вторым $\gamma_7 w^7$.

Итак, учитывая приведенные выше соображения, независимо от того, выполняется ли закон 1/7 или не выполняется, следует ожидать, что при турбулентном течении основное течение в середине канала обладает профилем скоростей с малыми кривизнами, а вблизи стенок приближается к границе.

Результаты, полученные в части I, к такому профилю непосредственно не применимы, поскольку в части I предполагалось, что производные w', w'' и т. д. конечны. Тем не менее, все методы, изложенные в части I, допускают обобщение на случай профилей рассматриваемого нами теперь типа (см. § 5). В частности, удается весьма просто решить «укороченное» уравнение (8) (в пределе при $R = \infty$) и удовлетворить граничным условиям. Профиль интересующего нас типа принадлежит (см. § 5) к числу возмущаемых профилей, и существует решение уравнения (28) с вещественным параметром c. Это необычайно важно и свидетельствует о том, что турбулентный профиль скоростей всегда неустойчив (см. § 5), или, иначе говоря, именно несоответствие между соотношением (42) и ламинарным законом сопротивления делает возможным возникновение неустойчивого профиля и, следовательно, турбулентности.

Решение уравнения (28) при $\alpha = 0$ имеет вид

$$\varphi = [w - w(+1)] \int\limits_{-1}^{y} \frac{dy}{[w - w(+1)]^2}. \tag{44}$$

Обращения в нуль функции φ при $y = -1$ мы добились, выбрав нижний предел интеграла равным -1. Выбрав $c = w(+1)$, мы обеспечили обращение φ в нуль и при $y = +1$. В этом нетрудно убедиться, преобразовав φ к следующему виду:

$$\varphi = [w - w(+1)] \int\limits_{w(-1)}^{w} \frac{dw}{[w - w(+1)]^2 w'}.$$

Действительно, интеграл в правой части имеет в точке $w = w(+1)$ особенность *более низкого* порядка, чем $1/(w - w(+1))$, так как в этой точке производная w' (в пределе при $R = \infty$) обращается в бесконечность. Итак, при $y = +1$ выполняется равенство $\varphi_1 = 0$. Таким образом, в пределе, для невязкой жидкости, амплитуду турбулентных колебаний мы представили в виде (44) и нашли значение β/α из граничных условий (оно оказалось равным $\beta/\alpha = w(+1)$). Ясно, что решение

$$\varphi = [w - w(-1)] \int\limits_{+1}^{y} \frac{dy}{[w - w(+1)]^2}, \tag{44a}$$

симметричное решению (44), также удовлетворяет граничным условиям. На этот раз $c = w(-1)$. Для течения Куэтта мы заключаем из (44) и (44a), что существуют две симметричные друг другу системы колебаний, в которых скорости волн совпадают со скоростями стенок $w(+1)$ и $w(-1)$.

Наоборот, для симметричного течения между двумя *покоящимися* стенками мы получаем $w(+1) = w(-1) = 0$. Из (44) и (44a) следует, что в этом случае любой интеграл вида

$$\varphi = w \int \frac{dy}{w^2}$$

удовлетворяет граничным условиям. Однако из требования а) (функция φ должна быть нечетной) мы заключаем, что в качестве нижнего предела интеграла $\int \frac{dy}{w^2}$ необходимо выбрать $y = 0$, т. е. положить

$$\varphi = w \int\limits_0^y \frac{dy}{w^2}. \tag{44б}$$

Для отношения β/α в случае симметричного решения получаем:

$$\omega(+1) = \omega(-1) = \frac{\beta}{\alpha} = 0. \tag{44в}$$

Что касается турбулентного основного течения, то нас пока больше всего интересует характер особенности на стенках, или, если положить $w \sim \eta^\varepsilon$, величина показателя ε. Мы хотим попытаться доказать, что из дифференциальных уравнений (38) или, соответственно, (39) в пределе $R = \infty$ в непосредственной близости от стенки действительно следует степенной закон изменения профиля скорости с показателем $\varepsilon = 1/7$. Правда, установить область сходимости используемых степенных рядов не удается, поэтому и все наши заключения относительно того, как ведет себя профиль скоростей на некотором расстоянии от стенки, нельзя считать строго доказанными. Мы разлагаем φ_1 и w в окрестности $\eta = 0$ по целым и положительным степеням η (такое разложение возможно для любой функции, не обращающейся при $\eta = 0$ в бесконечность), а η —по целым степеням w, и в результате приходим к формуле (43) для $\eta(w)$.

Мы утверждаем (и это — наиболее важный результат, который понадобится нам в дальнейшем), что в первом приближении функция φ_1 представима в виде ряда

$$\varphi_1 = \alpha_2\eta^2 + \alpha_5\eta^5 + \alpha_8\eta^8 + \ldots,$$

где $\alpha_2, \alpha_8, \ldots$ — вещественные, $\alpha_5, \alpha_{11}, \ldots$ — чисто мнимые коэффициенты и, кроме того, функция w представима в виде ряда

$$w = \beta_1\eta + \beta_7\eta^7 + \ldots\,. \tag{45}$$

Это утверждение можно доказать, подставляя в дифференциальные уравнения (38) разложения для φ_1 и w с неопределенными коэффициентами, если члены с коэффициентами $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, и β_0, β_1 заданы. Итак, попытаемся прежде всего найти эти члены. Заметим, что в силу граничных условий φ_1 и φ_1' при $\eta = 0$ должны быть равны нулю, поэтому степенное разложение для φ_1 начинается с члена $\alpha^2\eta^2$ ($\alpha_0 = \alpha_1 = 0$). Нетрудно проверить также, что следующий член $\alpha_3\eta^3$ выпадает, т. е. что он пренебрежимо мал по сравнению с остальными членами. Для этого путем однократного приближенного интегрирования второго уравнения (38) докажем, что α_3 имеет величину порядка αR. При $\alpha^2 = 0$ уравнение (38) имеет вид

$$\varphi_1''\left(w - \frac{\beta}{\alpha}\right) - \varphi_1 w'' = \frac{i}{\alpha R}\varphi_1'''',$$

откуда

$$\varphi_1'\left(w - \frac{\beta}{\alpha}\right) - \varphi_1 w' = \frac{i}{\alpha R}\varphi_1''' + A. \tag{46}$$

Постоянная A имеет здесь тот же порядок величины, что и левая часть уравнения (46) в середине канала, т. е. не выше единицы (см. ч. I, § 2). Отсюда мы

заключаем, что φ_1''' в пристеночной области в силу граничных условий имеет порядок αR. Аналогичное заключение справедливо и относительно α_3.

Итак, условимся пока считать коэффициент α_3 малым и попытаемся в дальнейшем обосновать наше допущение. Относительно констант β_0, β_1 заметим, что по условию a) (§ 1) первая из них (β_0) равна нулю.

Постоянные α_2 и β_1 сначала произвольны[28], и определить их из дифференциальных уравнений (38) и (39) в окрестности стенки оказывается невозможно. Определить постоянные α_2 и β_1 мы сумели бы лишь в том случае, если бы нам удалось аналитически продолжить решение (45) до другой стенки. Однако эта задача математически чрезвычайно сложная хотя бы потому, что, как будет показано, упрощенные уравнения (38) и (39) не позволяют вычислить φ_1 и w в середине канала. Это заставляет нас отказаться от решения задачи об аналитическом продолжении решения (45). Тем не менее, разложение φ_1 и w в окрестности *одной* стенки с неопределенными коэффициентами α_2, β_1 позволяет получить такие качественные особенности функций φ_1 и w, которые, как показывает эксперимент, совершенно не зависят от поведения жидкости в середине канала (к силу таких свойств относится, например, закон $w \sim \eta^{1/7}$).

Итак, подставим в уравнение (38) разложения

$$\varphi_1 = \alpha_2\eta^2 + \alpha_4\eta^4 + \alpha_5\eta^5 + \dots,$$
$$w = \beta_1\eta + \beta_2\eta^2 + \beta_3\eta^3 + \dots,$$

а второе уравнение заменим уравнением (46). Тем самым мы снова предположили, что параметр α очень мал. В данном случае (см. часть I, § 2) это означает лишь, что длины волн колебаний велики по сравнению с толщиной пограничного слоя. Кроме того, мы воспользовались соотношением (44в) и положили

$$\frac{\beta}{\alpha} = 0.$$

Первое уравнение (38) запишем в виде

$$-i\alpha R(\varphi_1'\bar{\varphi}_1 - \bar{\varphi}_1'\varphi_1) = 2\alpha R(\varphi_{1i}'\varphi_{1r} - \varphi_{1i}\varphi_{1r}') = w' - C_1 y. \tag{47}$$

Здесь φ_{1r} означает вещественную, а φ_{1i} — мнимую часть функции φ_1.

Из (46) и (47) мы получаем рекуррентные соотношения

$$n(n-1)(n-2)\alpha_n = -i\alpha R\sum_{s=2}^{n-2}(n-2s)\alpha_{n-1-s}\beta_{s-1}, \tag{48}$$

$$\begin{aligned} n\beta_n &= 2\alpha R\sum_{s=2}^{n-2}(n-2s)\alpha_{n-s}^i\beta_s^r;\\ \beta_1 &= C_1 y_{\text{стенка}},\\ 2\beta_2 &= C_1. \end{aligned} \tag{49}$$

Здесь α_s^r и α_s^i означают, соответственно, вещественную и мнимую часть коэффициента α_s.

[28] Коэффициент α_3 будем считать вещественным. Это предположение не накладывает никаких ограничений на общность, так как функция φ_1 определена лишь с точностью до множителя вида $e^{i\chi}$, поскольку в разложении (36) начало отсчета времени можно выбирать произвольно.

Из соотношения (48) прежде всего следует, что

$$\alpha_4 = 0.$$

Из (49) получаем:

$$\beta_3 = \beta_4 = \beta_5 = \beta_6 = 0.$$

Коэффициент β_2 можно также считать равным нулю.

Действительно, из (49) мы получаем, что

$$\beta_2 = \frac{\beta_1}{2y_{\text{стенка}}}.$$

Следовательно, при малых значениях параметра η член $\beta_2\eta^2$ пренебрежимо мал по сравнению с первым членом $\beta_1\eta$. При больших значениях η ведущими становятся старшие члены $\beta_7\eta^7$ и т. д.

Итак, предположим, что $\beta_2 = 0$ и вычислим старшие члены степенных разложений для β_1 и w.

Имеем:

$$\alpha_5 = -i\alpha R\frac{\alpha_2\beta_1}{3\cdot 4\cdot 5}; \quad \alpha_6 = \alpha_7 = 0; \quad \alpha_8 = -(\alpha R)^2\frac{\alpha_2\beta_1^2}{3\cdot 4\cdot 5\cdot 6\cdot 7\cdot 8}; \quad \alpha_9 = \alpha_{10} = 0;$$

$$\alpha_{11} = -(\alpha R)^3\left(\frac{\alpha_3^3\beta_2}{2\cdot 7\cdot 9\cdot 10\cdot 11} - \frac{\alpha_2\beta_1^3}{3\cdot 5\cdot 6\cdot 8\cdot 9\cdot 10\cdot 11}\right); \quad \alpha_{12} = \alpha_{13} = 0;$$

$$\beta_7 = -(\alpha R)^2\frac{\alpha_2^2\beta_1}{70}; \quad \beta_8 = \beta_9 = \beta_{10} = \beta_{11} = \beta_{12} = 0;$$

$$\beta_{13} = (\alpha R)^4\left(\frac{\alpha_2^2\beta_1^3}{5\cdot 5\cdot 6\cdot 8\cdot 11\cdot 13\cdot 14} - \frac{\alpha_2^4\beta_1}{7\cdot 10\cdot 11\cdot 13}\right).$$

Тем самым разложение (45), предложенное для w, обосновано. Нетрудно доказать, что из коэффициентов β при старших членах лишь каждый шестой отличен от нуля.

Разложение η в ряд по степеням w получаем отсюда в виде

$$\eta = \gamma_1 w_1 + \gamma_7 w^7 + \gamma_{13} w^{13} + \ldots,$$

где

$$\gamma_1 = \frac{1}{\beta_1}, \quad \gamma_7 = (\alpha R)^2\frac{\alpha_2^2}{70\beta_1^7},$$
$$\gamma_{13} = (\alpha R)^4\left(\frac{\alpha_2^4\cdot 3\cdot 3\cdot 17}{7\cdot 10\cdot 10\cdot 11\cdot 13\beta_1^{13}} - \frac{\alpha_2^2}{5\cdot 5\cdot 6\cdot 8\cdot 11\cdot 13\cdot 14\beta_1^{14}}\right). \tag{50}$$

Коэффициенты от γ_2 до γ_6, от γ_8 до γ_{12}, от γ_{14} и т. д. равны нулю[29].

Разложение (50) в действительности полностью совпадает с разложением (43), и, даже не зная постоянных α_2 и β_1, мы получаем закон $\eta \sim w^7$, выведенный Карманом из полуэмпирических соображений. Однако вычислить коэффициенты γ_1 и γ_7 не удается. Наоборот, из имеющихся эмпирических данных относительно

[29] Разумеется, разложение $\eta(w)$ в степенной ряд можно было бы вывести непосредственно из уравнений (46) и (47), не прибегая к обращению ряда для $w(\eta)$, если ввести w как независимую переменную. Однако прямой вывод приводит к несколько более сложным вычислениям.

коэффициентов β_1 и α_2, по-видимому, можно заключить, что γ_7 имеет порядок 1, а γ_1 — порядок $(\alpha R)^{-3/4}$, вследствие чего $\alpha_2 \sim (\alpha R)^{13/8}$. Таким образом, мы получаем дополнительное обоснование принятого ранее допущения, согласно которому $\alpha_3\eta \ll \alpha_2$. Если мы попытаемся оценить по порядку величины значения w, при которых третий член в разложении (50) мал по сравнению со вторым и, следовательно, реализуется профиль w^7, то получим $w \sim \beta_1^{-1/6}$, т. е. $w \sim R^{-1/8}$. Резюмируя, можно сказать, что в целом дифференциальные уравнения (38) позволяют сделать лишь качественный вывод о существовании профиля $w \sim \eta^{1/7}$. Наши вычисления не позволяют утверждать что-либо относительно того, что «профиль 1/7» наблюдается почти до середины канала. Впрочем, ничего иного нельзя было и ожидать, поскольку все остальные постоянные, входящие в закон, зависят от поведения жидкости вблизи рассматриваемой стенки.

Итак, попытаемся еще раз кратко перечислить все допущения, принятые нами при выводе разложения (50) из рекуррентных соотношений (48) и (49), и установить, сколь велика точность тех умозаключений, к которым мы пришли, исходя из разложения (50). Прежде всего вместо системы (37) мы воспользовались системой (38), т. е. пренебрегли величинами порядка φ_2/w. Затем мы положили $\alpha_3 = 0$, $\beta/\alpha = 0$, $\beta_2 = 0$ и тем самым пренебрегли величинами порядка

$$\frac{\alpha_3\eta}{\alpha_2}, \quad \frac{\beta}{\alpha w}, \quad \frac{\beta_2\eta}{\beta_1} \text{ и } \frac{\beta_2}{\beta_7\eta_6}.$$

Точность произведенных нами расчетов определяется величиной наибольшего из отброшенных членов. Простые оценки порядка величин, которые мы будем проводить здесь, позволяют считать наибольшим член φ_2/w, однако при $R \to \infty$ и он стремится к нулю. Таким образом, выбирая достаточно большие числа Рейнольдса R, мы можем доводить результаты, полученные из (48), (49) и (50), до сколь угодной высокой точности.

Что касается закона сопротивления Блазиуса, то его, разумеется, можно вывести, обратив приведенный выше ход рассуждений, при помощи соображений размерности из закона $\eta \sim w^7$, если предположить, что поведение w вблизи стенки не зависит от ширины канала. Однако вопрос о том, следует ли это физически весьма правдоподобное допущение из дифференциальных уравнений (38), (39), мы в силу названных выше причин (невозможности аналитического продолжения) вынуждены оставить без ответа.

Тем не менее, оценивая различные члены уравнений (38) и (39) по порядку величины, мы можем прийти к заслуживающему внимания заключению относительно закона сопротивления. Во всем канале, за исключением узкого пристеночного слоя и точки $y = 0$ (см. ниже формулу (66)), мы можем, учитывая величину постоянной C_1 (см. с. 449), использовать не первое из уравнений (38), а уравнение

$$i\alpha R(\varphi_1'\bar{\varphi}_1 - \bar{\varphi}_1'\varphi_1) = C_1 y. \tag{51}$$

Поскольку амплитуда φ_1 не возрастает неограниченно при $R \to \infty$ (обращение φ_1 в бесконечность лишило бы физического смысла все наши расчеты), то C_1 по порядку величины не превышает αR, в силу чего показатель ξ в соотношении (40) должен быть меньше единицы (что в некотором смысле подтверждается соотношением (41)). Отсюда следует (ср. соотношения (42) и (40)), что закон сопротивления $\tau = \text{const}\cdot U^2$, обычно принимаемый в гидравлике, является верхней гранью для всех мыслимых законов сопротивления при турбулентном движении, *не зависящий от свойств стенки*. В качестве гипотезы можно принять, что закон

сопротивления справедлив лишь для гладких стенок, и что для шероховатых стенок закон сопротивления ближе к квадратичному[30]. При шероховатых стенках амплитуда φ_1 не зависит от R и по порядку величины сравнима с характерным размером шероховатостей. Кроме того, если стенки шероховаты, то из граничных условий уже не следует, что амплитуда φ_1 в первом приближении должна быть вещественной, как это было в случае решения (44).

Результаты этого параграфа остаются в силе, если уравнения (38) заменить уравнениями (39).

§ 3

Турбулентное движение вне слоя, непосредственно примыкающего к стенкам

Для движения в середине канала существенно, что амплитуда φ_1 составлена из двух решений уравнения (7а), встречающихся и в случае невязкой жидкости, когда выполняется уравнение (8) (см. часть I, § 2). Важнейшее свойство амплитуды φ_1, которое следует из этого замечания, состоит в том, что с точностью до величин порядка φ_2 и $(\alpha R)^{-1}$ выполняется условие

$$\varphi_1'\bar{\varphi}_1 - \bar{\varphi}_1'\varphi_1 = \text{const}. \tag{52}$$

Оно следует из теоремы Абеля в силу того, что φ_{1r} и φ_{1i} (т.е. вещественная и мнимая часть амплитуды φ_1) с точностью до величин порядка φ_2 и $(\alpha R)^{-1}$ являются решениями дифференциального уравнения (8).

Отсюда мы заключаем, что уравнения (38) или (39) не дают полного описания движения по всей ширине канала и что необходимо снова обратиться к уравнению (37) и к соответствующей ему системе уравнений в случае течения Куэтта.

Такой вывод приводит, вообще говоря, к усложнению математической задачи. Решить ее удается сравнительно легко лишь для течения Куэтта, поскольку в этом случае первое уравнение (39) с точностью до величин порядка w'/C и, следовательно, $(\alpha R)^{-3/4}$ и φ_2^2 (см. (37)) *совпадает с уравнением* (52). Таким образом, в то время как уравнение (52) в силу самого вывода его из теоремы Абеля выполняется с точностью до величин порядка φ_2, в случае течения Куэтта должно выполняться еще с точностью до φ_2^2 уравнение (39). Этому требованию мы удовлетворим, положив

$$\varphi_2 = 0. \tag{53}$$

Это выражение надлежит рассматривать как решение нашего основного дифференциального уравнения для течения Куэтта.

Если учесть (53), то из уравнений (37) для φ_1 следовало бы, что

$$\varphi_1'''\varphi_1 - \varphi_1''\varphi_1 = 0, \tag{54}$$

однако для течения Куэтта выполняется не система уравнений (37), а более сложная система, приводить которую здесь мы не будем. Заметим лишь, что эта система так же, как система уравнений (37) при $\varphi_2 = 0$, приводит к уравнению (54) и, следовательно, к решению

$$\varphi_1 = ae^{\gamma y} + be^{-\gamma y}, \tag{55}$$

[30] См. более точные теоретические исследования Кармана и экспериментальные исследования Шиллера (Zs. Phys., 1923, 3, 2).

где a, b, γ — произвольные комплексные постоянные. Это позволяет получить для w из второго уравнения (39) или его редуцированного варианта — уравнения (8) — выражение вида

$$w - c = a_1 e^{\gamma_2 y} + b_1 e^{\gamma_1 y}. \tag{56}$$

Поскольку разность $w - c$ на одной стенке должна обращаться в нуль (в противном случае профиль w был бы нечетным относительно $y = 0$), то профиль w должен выродиться в линейный за счет обращения в нуль показателя γ_1 и подходящего увеличения коэффициентов a_1 и b_1.

Итак, *мы пришли к важному выводу о том, что для течения Куэтта основной профиль w турбулентного движения по всей ширине канала изменяется по существу линейно* (хотя значительно отличается от ламинарного профиля: по сравнению с ламинарным турбулентный профиль более уплощен), *а* (см. часть II, § 2) *на границе стремится к стенкам как $\eta^{1/7}$.*

Перейдем теперь к более сложному случаю течения между двумя покоящимися стенками, т. е. к системе (37). Разумеется, в качестве решения нам придется довольствоваться грубыми приближениями. Прежде всего мы можем вычеркнуть правые части всех трех уравнений (37), а именно вязкие члены. Эта операция полностью обоснована в части I, § 2. Кроме того, положим $\beta/\alpha = 0$ (см. условие (44в)).

В результате мы получим для φ_1 вместо второго уравнения (37) следующее уравнение:

$$\varphi_1'' w - w''\varphi_1 - \alpha^2 w\varphi_1 - \varphi_2'(\bar\varphi_1'' - \alpha^2\bar\varphi_1) - 2\varphi_2(\bar\varphi_1''' - \alpha^2\bar\varphi_1') + \\ + 2\bar\varphi_1'(\varphi_2'' - 4\alpha^2\varphi_2) + \bar\varphi_1(\varphi_2''' - 4\alpha^2\varphi_2') = 0. \tag{57}$$

Если амплитуду φ_1 разложить как решение уравнения (57) по степеням α^2 и φ_2, учесть, что φ_1 нечетна (см. условие (44б)) и положить $\varphi_1 = \varphi_{10} + \varphi_{11}$, то удерживая только линейные члены, получим:

$$\varphi_{10} = aw \int_0^y \frac{dy}{w^2}, \tag{58}$$

$$\varphi_{11} = aw \int_0^y \frac{dy}{w^2} \int_0^y dy\Big(\alpha^2 w\varphi_{10} + \varphi_2'\varphi_{10}'' + 2\varphi_2\varphi_{10}''' - 2\varphi_{10}'\varphi_2'' - \varphi_{10}\varphi_2'''\Big). \tag{59}$$

Амплитуда φ_1 определена здесь лишь с точностью до постоянного множителя a, который мы, не ограничивая общности, можем считать вещественным.

Подставив полученное выражение для φ_1 в упрощенное первое уравнение (37), а именно в уравнение

$$\varphi_1\bar\varphi_1'' - \bar\varphi_1\varphi_1'' = \text{const}, \tag{60}$$

получим (φ_{2i} — мнимая часть амплитуды φ_2)

$$\left(\varphi_{2i}'\varphi_{10}'' + 2\varphi_{2i}\varphi_{10}''' - 2\varphi_{2i}''\varphi_{10}' - \varphi_{2i}'''\varphi_{10}\right) \int_0^y \frac{dy}{w^2} = \text{const}. \tag{61}$$

Как следует из третьего уравнения (37) и вещественности φ_1 в первом приближении, амплитуда φ_2 удовлетворяет уравнению

$$\varphi_{2i}'' w - \varphi_{2i} w'' = 0, \tag{62}$$

откуда

$$\varphi_{2i} = bw\int_0^y \frac{dy}{w^2} = c\varphi_{10}. \tag{63}$$

Если это выражение для φ_{2i} подставить в (61) и учесть, что при $y = 0$ левая часть уравнения (61) и, следовательно, постоянная в его правой части обращается в нуль (для постоянной в правой части уравнения (60) это означает лишь, что она равна нулю в первом приближении, т. е. имеет такой же порядок малости, как величины $\varphi_1\varphi_2^2, \alpha^2\varphi_1\varphi_2$ или $\alpha^4\varphi_1$), то получится уравнение

$$\varphi_{10}\varphi_{10}''' - \varphi_{10}''\varphi_{10}' = 0, \tag{64}$$

полностью совпадающее с уравнением (54).

Необходимо заметить, однако, что в окрестности точки $y = 0$ уравнение (64) так же, как и уравнение (54), тривиально: поскольку φ — нечетная функция от y, то в указанной окрестности уравнение (64) выполняется тождественно. Следовательно, уравнение (64) не позволяет определить в этой окрестности профиль w. Для симметричного профиля w это обстоятельство приводит к характерному разрыву в точке $y = 0$. (Дифференциальные уравнения не позволяют установить существование аналогичного разрыва для нечетного профиля). Действительно, как показано выше при интегрировании уравнения (37a), мы получаем (после однократного интегрирования) уравнение

$$2\alpha R\left[\bar{\varphi}_1''\varphi_1 - \varphi_1''\bar{\varphi}_1 + 2(\bar{\varphi}_2''\varphi_2 - \varphi_2''\bar{\varphi}_2) + \ldots\right] = w'' - C, \tag{65}$$

(где C (см. с. 449), если выполняется закон Блазиуса, имеет величину порядка $(\alpha R)^{3/4}$, т. е. весьма велико). В точке $y = 0$ правая часть уравнения (65) обращается в нуль вместе с φ_1 и φ_2 (обе амплитуды — нечетные функции от y). Следовательно, в точке $y = 0$ выполняется соотношение

$$w''_{y=0} = C, \tag{66}$$

и значение производной $w''_{y=0}$ очень велико ($\sim (\alpha R)^{3/4}$), т. е. что профиль w претерпевает в точке $y = 0$ резкий излом[31] (радиус кривизны $\sim (\alpha R)^{-3/4}$). На малом расстоянии от этой точки профиль w, как следует из уравнения (64), изменяется по существу линейно.

Итак, мы приходим к следующему выводу.

В случае течения между двумя неподвижными стенками (так же, как и в случае течения в трубе) профиль по всей ширине канала в достаточно хорошем приближении можно считать линейным, но в середине он претерпевает резкий излом (и «прилипает» к стенкам по закону $y^{1/7}$) (см. рис. 3).

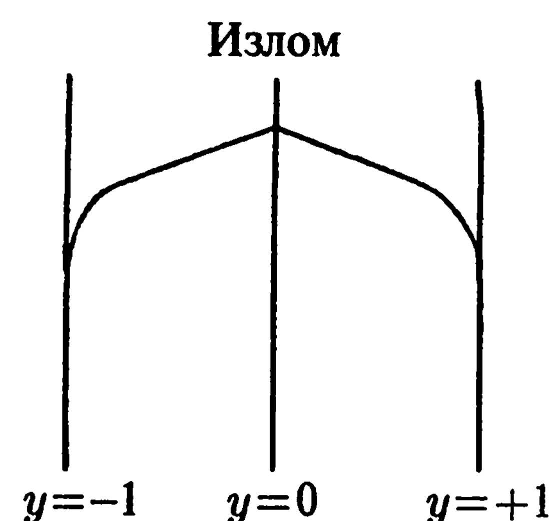


Рис. 3

Физическая причина резкого излома состоит в том, что, как следует из соображений симметрии, градиент *турбулентного* переноса импульса при $y = 0$ обращается в нуль, а поскольку градиент переноса полного импульса *постоянен* по всей ширине канала, то градиент *ламинарного* переноса импульса, т. е. w'' в точке $y = 0$ должен быть очень большим.

---

[31] На существование этого излома мне любезно указал проф. Прандтль, исходивший из экспериментальных данных. Насколько можно судить, экспериментально наблюдаемый излом не столь резок, как это следует из вычислений. Это, несомненно, свидетельствует о том, что предположение (а) (с. 448) относительно симметрии *вихря и возмущений* не вполне соответствует действительности.

§ 4

Заключительные замечания и обзор физических результатов

В проведенных нами исследованиях имеются два существенных пробела: во-первых, они не позволяют получить переход от профиля $\eta^{1/7}$ к линейному профилю в средней части канала; во-вторых, они ограничены лишь большими числами Рейнольдса R и поэтому не дают минимального числа R (если оно существует), при котором еще возможно турбулентное движение. Особенно трудно восполнить первый из этих пробелов (см. с. 454). Мы не располагаем никакими методами, которые позволили бы получить удовлетворительное решение поставленной задачи. Можно попытаться сшить приближения, описывающие профиль скоростей в пристеночной области и в середине канала. Для этого необходимо потребовать, чтобы в соответствующей точке $\varphi_1, \varphi_1', \varphi_1'', \varphi_1''', w$ и w' были непрерывны. Сходимости разложений (45) и (50) вряд ли достаточно для того, чтобы гарантировать существование такого неоднозначного заданного приближения: конечный результат (профиль w) сильно зависит от характера сшивки пристеночного и центрального участков. Кроме того, весьма сомнительно, чтобы неукоснительное выполнение предложенной нами процедуры (см. с. 448) привело к существенно новым физическим результатам, находящимся в согласии с экспериментом, поскольку все исходные допущения являются весьма сильной идеализацией того, что происходит в действительности.

Наоборот, восполнение второго пробела в принципе не вызывает каких-либо затруднений — все необходимые для этого вспомогательные средства содержатся в части I. Если профиль w полностью известен, то изложенные в части I методы позволяют вычислять, как это сделано в части I, § 6, минимальное число Рейнольдса R, при котором возможно турбулентное движение. Например, критическое число Рейнольдса можно вычислить для профиля, полученного упомянутым выше методом при сшивке двух приближений или взять за основу экспериментально наблюдаемый профиль и, следовательно, найти число Рейнольдса полуэмпирическим методом. И в том и в другом случае мы придем к числам Рейнольдса одного порядка, а именно $R \sim 10^3$ (правдоподобность такого утверждения подтверждается исследованиями, проведенными в части I, и прямыми расчетами, которые мы здесь не приводим). Точное значение критического числа Рейнольдса весьма сильно зависит от того, каким способом был получен профиль. В этом нетрудно убедиться, сравнивая теоретические профили с экспериментально наблюдаемыми. Именно поэтому мы и не стали приводить здесь соответствующих вычислений критического числа Рейнольдса.

В заключение перечислим кратко, какие физические результаты следуют из проведенных нами исследований по проблеме турбулентности. В части I мы показали, что ламинарное движение и его устойчивость не имеют особого значения для проблемы турбулентности и существует критическое число Рейнольдса. В части II мы рассмотрели собственно турбулентное движение, что позволяет нам высказать некоторые утверждения относительно турбулентного состояния движения. В общем случае распределение скоростей по всему каналу носит простейший характер: в зависимости от условий эксперимента оно постоянно или линейно (§ 3). В случае (симметричного) течения между двумя неподвижными стенками распределение скоростей обладает резким изломом. В непосредственной близости от стенок оно переходит в профиль $\eta^{1/7}$ (§ 2). Проведенные расчеты не позволяют прийти к каким-либо выводам относительно того, сколь далеко простирается внутрь канала область применимости профиля $\eta^{1/7}$. В случае течения Куэтта колебания во внутренней части канала происходят почти гармонически (§ 3, уравнение (53)). Вблизи стенок возникают все обертоны. Скорость волн совпадает со скоростью стенок (§ 2, формулы (44)–(44в)). В случае течения Куэтта существуют две группы турбулентных

колебаний. Скорость распространения колебаний одной группы совпадает со скоростью одной стенки, колебания другой группы распространяются со скоростью другой стенки. Следовательно, турбулентные возмущения внешне обладают характером возмущений, вносимых стенками. Необходимо, однако, подчеркнуть, что эти возмущения не зависят от шероховатости стенок и могут вызываться такими воздействиями, как свободные колебания. Амплитуда турбулентных волн по мере приближения к стенкам сильно возрастает (см. формулу (44) из § 2) и лишь в непосредственной близости от стенки стремится к нулю.

По порядку величины длин волн возникающие колебания (часть I, § 8) сравнимы с шириной канала, хотя и несколько больше ее. Минимальное значение числа Рейнольдса (часть I, § 8), при котором еще возможна турбулентность, по порядку величины достигает 10^3. Что касается закона сопротивления (§ 2, соотношение (50)), то для гладких стенок профиль $\eta^{1/7}$ при определенных предположениях приводит к закону Блазиуса $\tau \sim u^{7/4}$. Для шероховатых стенок закон сопротивления, по-видимому (§ 2), приближается к принятому в гидравлике закону $\tau \sim u^2$. Цель настоящей работы состояла не столько в установлении всех этих в основном известных закономерностей, сколько в попытке показать, что все полученные ранее отчасти противоречивые результаты допускают единое математическое описание в рамках простых предположений.

Я хотел бы выразить искреннюю признательность моему высокочтимому учителю профессору Зоммерфельду, побудившему меня заняться этой работой и во многом способствовавшему ее успешному завершению.

ЗАМЕЧАНИЯ ПО ПОВОДУ ПРОБЛЕМЫ ТУРБУЛЕНТНОСТИ*

Статья посвящена сравнению и критическому обсуждению различных физических представлений, лежащих в основе прежних исследований по устойчивости ламинарных течений, и новой статистической теории турбулентности.

В двадцатые и тридцатые годы Зоммерфельд нередко обсуждал со своими учениками проблему турбулентности, считавшуюся на протяжении долгого времени нерешенной проблемой новой гидродинамики, имеющей первостепенное значение. С тех пор статистическая теория турбулентности, основы которой были заложены около 10 лет назад Тейлором [1] и Карманом [2], позволила достичь столь решительных успехов, что физическое ядро теории турбулентности в настоящее время можно считать вполне сформировавшимся. В настоящей статье мы излагаем различные физические представления, которые различные авторы использовали в свое время для решения проблемы турбулентности, и еще раз подвергаем их критическому разбору.

Около 14 лет назад Зоммерфельд [3] поставил вопрос: почему некоторые ламинарные течения, описываемые при любых скоростях решениями уравнений гидродинамики, по достижении определенных значений числа Рейнольдса становятся неустойчивыми? Такая постановка вопроса исходит из представления о том, что в невязкой жидкости могут существовать любые ламинарные течения, известные из классической гидродинамики, и лишь вязкость при определенных условиях лишает эти течения устойчивости. Предположение о том, что переход от ламинарного течения к турбулентному возникает лишь под действием вязкости, обосновывалось ссылкой на теорему Гельмгольца о вихре. Действительно, турбулентное течение — это такое течение, при котором в жидкости повсюду распределены большие и малые вихри. Такое течение не может возникнуть в невязкой жидкости, если в ней с самого начала в достаточно больших областях нет вихрей.

Однако, как показали исследования устойчивости ламинарных течений, проведенные в последующие годы [4], в действительности для определенных классов ламинарных течений при достаточно больших числах Рейнольдса наступает неустойчивость [5]. Позднее Бюргерс [6] на упрощенной математической модели

* Bemerkungen zum Turbulenzproblem. — Zs. Naturforsch., 1948, 3a, H. 8–11, 434–437. *Перевод Ю. А. Данилова.*

[1] *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc. London, 1935, **A 151**, 421.

[2] *Karman Th. von, Howarth L.* Proc. Roy. Soc. London, 1938.

[3] *Sommerfeld A.* Atti IV Congr. Intern. Mat., Rome, 1908, 116–124.

[4] *Hopf L.* Ann. Phys., 1914, **43**, 1; *Noether F.* Zs. angew. Math. Mech., 1926, **6**, 232; *Sexl Th.* Ann. Phys., 1927, **83**, 835; 1927, **84**, 807; 1928, **87**, 570.

[5] *Heisenberg W.* Ann. Phys., 1924, **74**, 577; *Tollmien W.* Nachr. Gesell. Wiss. Göttingen, math.-phys. Klasse, 1929; *Schlichting N.* Ann. Phys., 1932, **14**, 905. Недавно проблема устойчивости была вновь подвергнута всестороннему анализу в работе *Lin C. C.* Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 1944, **30**, 316; Quart. J. Appl. Math., 1945–1946, **3**, 117, 218, 277.

[6] *Burgers J. M.* Verh. Kon. Akad. Wetensch. Amsterdam, 1939, **17**, 1.

исследовал, каким образом при увеличении числа Рейнольдса появляются новые типы решений и тем самым утрачивает устойчивость первоначальное решение.

Новая статистическая теория турбулентности исходит из совсем иной постановки вопроса. Она интересуется развитой турбулентностью и рассматривает жидкость как механическую систему с чрезвычайно большим числом степеней свободы. Поскольку априори более вероятно, что энергия каким-то образом распределится по всем степеням свободы, чем возникнет какое-либо определенное ламинарное течение, то, как и статистическая механика, новая теория изучает прежде всего общие свойства распределения энергии по степеням свободы. Априори ясно, что при рассмотрении системы с очень большим числом степеней свободы бессмысленно интересоваться мелкими деталями состояния течения, так как это состояние непрестанно изменяется и мгновенные характеристики его практически не имеют значения. Необходимо поэтому заранее установить, какие именно свойства турбулентного течения заслуживают внимания. Здесь по существу мы сталкиваемся с тем же вопросом, что и в оптике непрерывных спектров. Подобно тому, как в случае электромагнитных волн с непрерывным спектром мы, как правило, интересуемся не фазовыми соотношениями, а распределением энергии по длинам волн, так и при рассмотрении турбулентного течения скорость как функцию точки можно считать разложенной в ряд Фурье и обозначить, например, через $\rho F(k)\,dk$ энергию (ρ — плотность массы), приходящуюся в единице объема на интервал волновых чисел от k до $k+dk$. Таким образом, задача сводится к определению вида распределения $F(k)$, т. е. «спектра» турбулентности, в то время как всеми сведениями о непрерывно изменяющихся фазовых соотношениях мы пренебрегаем. Статистические корреляции между скоростями в двух различных точках внутри жидкости по существу определяются спектром.

Так же, как и в оптике, существует определенное распределение, возникающее в состоянии термодинамического равновесия, а именно — распределение Планка, вследствие чего должно существовать также и определенное равновесное распределение энергии по вихрям различных размеров. Практически такого равновесного распределения можно достичь, например, если в течение продолжительного времени перемешивать жидкость. Правда, распределение энергии по самым крупным вихрям не будет статистическим, так как форма и скорость крупных вихрей зависит от того, как именно перемешивается жидкость. Но крупные вихри порождают вихри меньших размеров или распадаются на них, и в области меньших длин волн быстро устанавливается стационарный режим, при котором энергия переносится от больших вихрей к меньшим и в конце концов из-за трения превращается в тепло.

Спектр равновесного распределения в пределе при очень больших числах Рейнольдса вывели независимо Колмогоров[7)], Онзагер[8)] и Вайцзеккер[9)]. В работе Прандтля[10)] также содержатся соображения подобия, из которых исходили названные нами авторы. В своих предыдущих работах[11)] автор настоящей статьи рассчитал продолжение спектра в область самых мелких вихрей (соответствующие таким вихрям числа Рейнольдса уже нельзя считать большими).

Наши расчеты основывались на предположении о равновесии. Формально и с точки зрения физики такое предположение можно считать аналогом больцмановского предположения о числе соударений. Действительно, мы хотим найти

---

7) *Колмогоров А. Н.* ДАН СССР, 1941, **30**, 301; **32**, 16.

8) *Onsager L.* Phys. Rev., 1945, **68**, 286.

9) *Waizsäcker C. F. von.* Zs. Phys., 1942, **124**, 614.

10) *Prandtl L.* Nachr. Gesell. Wiss. Göttingen, math.-phys. Klasse, 1945. S. 6.

11) См. *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1948, **124**, 628.

количество энергии S_k, поступающей в единицу времени в интервал волновых чисел от 0 до k из области больших волновых чисел (т. е. от меньших вихрей). Перенос энергии осуществляется за счет трения. При этом наряду с обычной вязкостью жидкости возникает дополнительная турбулентная вязкость, т. е. перенос импульса мелкими турбулентными вихревыми движениями. Эти мелкие хаотические движения при наличии средних градиентов скорости переносят импульс так же, как молекулярные движения, и поэтому также порождают своего рода вязкость. Эта турбулентная вязкость по порядку величины достигает $\rho l_k v_k$, где l_k — введенная Прандтлем длина перемешивания, v_k — скорость рассматриваемого вихря с волновым числом k. Если турбулентную вязкость выразить через спектр $F(k)$ для всех волновых чисел от k до ∞, то из соображений размерности получим простейшее выражение для турбулентной вязкости:

$$\varkappa\rho \int_k^\infty \sqrt{\frac{F(k')}{k'^3}}\,dk', \tag{1}$$

где $\varkappa$ — безразмерный коэффициент, равный по экспериментальным данным $\approx 0{,}8$. Если μ — молекулярная вязкость, то из известных формул гидродинамики получаем

$$S_k = \left(\mu + \varkappa\rho \int_k^\infty \sqrt{\frac{F(k')}{k'^3}}\,dk'\right) \int_0^k 2F(k'')\,k''^2 dk''. \tag{2}$$

В стационарном режиме S_k при больших волновых числах не должна зависеть от k, если подвод энергии происходит при малых значениях k (т. е. осуществляется большими вихрями). Из этого условия следует, что спектр имеет вид $F(k) \sim k^{-5/3}$ для вихрей с большими числами Рейнольдса и $F(k) \sim k^{-7}$ для вихрей с малыми числами Рейнольдса, т. е. для коротковолнового конца спектра[12]. Если речь идет о развитом турбулентном течении, то выражение (2) позволяет рассматривать и нестационарные явления, например, затухание турбулентного течения со временем. Если энергия не подводится извне, то из (2) непосредственно следует, что

$$\frac{d}{dt}\left[\rho \int_0^k F(k')\,dk'\right] = -\left(\mu + \varkappa\rho \int_k^\infty \sqrt{\frac{F(k')}{k'^3}}\,dk'\right) \int_0^k 2F(k'')\,k''^2 dk''. \tag{3}$$

Это уравнение позволяет рассчитывать для затухающего турбулентного течения вид спектра и характер затухания[13].

Итак, статистическая теория турбулентности исходит из основополагающего допущения, согласно которому течение даже невязкой жидкости «в общем случае» турбулентно, поскольку невязкая жидкость представляет собой систему с большим числом степеней свободы. Ламинарное течение — событие столь же маловероятное, как и направленное движение молекул в газе. Благоприятные условия для возникновения ламинарных течений создаются лишь при достаточно большой вязкости, так как при малых числах Рейнольдса вязкость подавляет образование вихрей, вследствие чего течение по крайней мере в области малых длин волн сглаживается. В то время как при исследовании устойчивости ламинарных течений вязкость выступает

[12] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1948, **124**, 628.
[13] Ibid.

как сила, делающая эти течения неустойчивыми и приводящая к возникновению турбулентности, в статистической турбулентности вязкость выступает как сила, подавляющая возникновение вихрей и стремящаяся превратить течение в ламинарное.

Противоречие между этими двумя утверждениями лишь кажущееся. Действительно, в первом случае речь идет не о состоянии равновесия, а о скорости, с которой некий неравновесный процесс приближается к состоянию равновесия (на языке химии — о скорости реакции), а во втором случае требуется найти равновесное распределение скоростей. Хотя в невязкой жидкости ламинарное течение представляет собой маловероятный частный случай движения, все же скорость перехода в турбулентное состояние равновесия сначала исчезающе мала. Она стала бы заметно отличной от нуля в том случае, если бы в жидкости заранее существовало множество мелких вихрей, т. е. если бы возникла создаваемая турбулентностью «турбулентная вязкость». Отсюда следует, что принципиально не может существовать течение, при котором жидкость прилипала бы к стенкам и при нулевой вязкости утрачивалась бы устойчивость, так как вязкость с успехом допускает замену турбулентной вязкостью, обусловленной малыми вихрями. Такого рода неустойчивость невозможно получить обычными методами малых колебаний, так как время, за которое колебание нарастает, зависит от амплитуды колебаний малых вихрей и при амплитудах, стремящихся к нулю, становится бесконечно большим. Чтобы неустойчивость следовала из вычислений, необходимо учесть в колебаниях нелинейные члены. К сожалению, при этом нам пришлось бы пожертвовать относительной математической простотой метода малых колебаний. Отсюда следует, что метод малых колебаний принципиально не применим к проблемам гидродинамической неустойчивости, чем отчасти и объясняются несколько противоречивые результаты прежних исследований в этой области.

Наоборот, в состоянии равновесия вязкость подавляет малые вихри и сглаживает течение. Она сдвигает равновесие в сторону, благоприятную для мелких турбулентных движений. Если развитое турбулентное течение в этом смысле рассматривать как равновесный процесс и сравнить, например, с распределением скоростей Максвелла, то необходимо иметь в виду, что такое сравнение в одном пункте неудовлетворительно. В то время как термодинамическое равновесие, если только подождать достаточно долго, в замкнутой системе устанавливается всегда, для установления турбулентного равновесного течения необходим непрестанный подвод энергии, так как вязкость непрестанно превращает энергию в тепло и тем самым отводит ее. Учитывая эти соображения, спектр турбулентного течения можно разделить по крайней мере на три физически различные области длин волн. В области длинных волн энергия в общем случае передается жидкости, например, от движущегося относительно жидкости тела. Ясно, что в длинноволновой области не существует никакого равновесия, вид и частота возникающих вихрей зависит от конкретного способа переноса энергии, и расчет течения заведомо не является чисто статистической задачей. Затем идет область меньших вихрей, порождаемых более крупными вихрями и в свою очередь передающих энергию еще меньшим вихрям. В этой области реализуется в хорошем приближении идеальный случай рассмотренного Колмогоровым[14], Онзагером[15] и Вайцзеккером[16] статистического равновесия ($F(k) \sim k^{-5/3}$). Наконец, к области коротких волн примыкает третья равновесная область[17], в которой энергия вихрей расходуется в основном на нагревание за счет трения ($F(k) \sim k^{-7}$).

[14] *Колмогоров А. Н.* Указ. соч.

[15] *Onsager L.* Op. cit.

[16] *Waizsäcker C. F. von.* Op. cit.

[17] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1948, **124**, 628.

Разумеется, во многих случаях до возникновения равновесия не доходит. Нередко первая область примыкает непосредственно к третьей, так как энергия превращается в тепло сразу же без того, чтобы значительная доля ее распределилась по всем степеням свободы. Распределение энергии между областями с различными длинами волн всегда обусловлено нелинейными, инерционными членами дифференциальных уравнений гидродинамики. Следовательно, чтобы инерция стала играть сколько-нибудь значительную роль и энергия могла переходить из одной области длин волн в другую, скорости должны достичь некоторой пороговой величины. Математический анализ промежуточных случаев турбулентного течения, в которых равновесие так и не устанавливается, сопряжено с особыми трудностями, как и в кинетической теории газов. Простое математическое описание допускает лишь два предельных случая: сильно упорядоченное (ламинарное) и полностью неупорядоченное (статистически турбулентное) течение. Турбулентное течение надлежит считать правилом, а ламинарное — исключением. Это следует просто из того, что жидкость обладает очень большим числом степеней свободы.

К СТАТИСТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ТУРБУЛЕНТНОСТИ*

Посвящается Рихарду Бекеру
по случаю его 60-летия

На основе обычного разложения в ряд Фурье рассмотрены математические основы подхода к теории турбулентности, предложенного в предыдущей работе Вайцзеккера. Спектр турбулентного движения прослежен до самых малых длин волн, т. е. до ламинарной области, вычислены средние флуктуации давления и корреляционные функции. В заключение предпринята попытка вывести из уравнений гидродинамики характеристическую постоянную для диссипации энергии в статистическом турбулентном движении.

В развитой Тейлором[1)] и Карманом[2)] статистической теории турбулентности хаотическое турбулентное движение жидкости описывается определенными характеристическими функциями, между которыми существуют простые математические соотношения: «спектральное» распределение энергии по волнам различной длины, корреляции между скоростями в точках, разделенных заданными пространственными или временными интервалами. Обширные эмпирические и теоретические данные об этих функциях приведены в работах Тейлора.

В работе Вайцзеккера[3)] дан вывод важнейшей из характеристических функций — спектрального распределения энергии — из соображений подобия в предельном случае больших чисел Рейнольдса. В настоящей работе соображения, развитые Вайцзеккером, сначала переводятся на обычный язык разложения Фурье, а затем полученный «перевод» используется для изучения обрыва спектра при высоких частотах из-за молекулярной вязкости. Попутно мы получаем ряд следствий относительно корреляционных функций и флуктуаций давления, а в заключении делаем попытку вывести основную постоянную, характеризующую диссипацию энергии.

---

* Zur statistischen Theorie der Turbulenz. — Zs. Phys., 1948, **124**, 628–651. *Перевод Ю. А. Данилова.*

1) *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc., 1935, **A 151**, 421; 1936, **A 156**, 307; 1938, **A 164**, 15; 1938, **A 164**, 476.

2) *Karman Th. von.* J. Aero. Sci., 1937, **4**, 131.

3) Работа Вайцзеккера и настоящая работа явились результатом нашего сотрудничества во время совместного пребывания в Англии в 1945 г. Лишь после того, как обе работы были закончены, Тэйлор (в начале 1946 г.) любезно сообщил нам, что их основные идеи были сформулированы и опубликованы Колмогоровым (*Колмогоров А. Н.* ДАН СССР, 1941, **30**, 299–303; **31**, 538–541; **32**, 19–21) и Онзагером (*Onsager L.* Phys. Rev., 1945, **68**, 286) (см. обзор Бэтчелора на VI Международном конгрессе по прикладной механике в Париже, 1946 г.). Примерно в то же время нам стало известно о работе Прандтля и Вигхардта, содержащей те же идеи (*Prandtl L.*, *Wieghardt K.* Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, math.-phys. Klasse, 1945, 6). Нашу работу можно рассматривать как дополнение и дальнейшее развитие этих более ранних работ.

I

Перевод соображений Вайцзеккера на язык компонент Фурье

При достаточно больших числах Рейнольдса диссипация энергии происходит при турбулентном движении так, что крупномасштабные элементы турбулентности теряют энергию: перенос энергии и импульса мелкомасштабными элементами турбулентности действует на крупномасштабные элементы как своего рода дополнительная вязкость (см., например, работу Прандтля[4]). В стационарной экспериментальной установке энергия непрестанно переходит от крупномасштабных к мелкомасштабным элементам турбулентности, при этом в определенной области спектра убыль энергии при больших длинах волн соответствует приращению энергии при меньших длинах волн. Для поддержания такого равновесия необходимо определенное распределение энергии, которое, как показал Вайцзеккер, если пренебречь молекулярным трением, удовлетворяет закону

$$\rho\frac{\bar{v}^2}{2} = \rho\frac{\bar{v}_0^2}{2} = \rho\int F(k)\,dk, \qquad F(k)\sim k^{-5/3} \tag{1}$$

(здесь $k = 2\pi/\lambda$ — волновое число (λ — длина волны), $v_0 = \sqrt{\bar{v}^2}$ — величина средней скорости[5]). Спектр $F(k)\sim k^{-5/3}$ ограничен с двух сторон. При малых волновых числах, т.е. при больших длинах волн, течение как бы перестает быть изотропным турбулентным течением. Действительно, самые крупные элементы турбулентности определяются геометрией экспериментальной установки, порождающей турбулентность. Следовательно, конец спектра при малых k вообще не может быть предметом чисто статистической теории. При больших k спектр ограничен молекулярной вязкостью. Это означает, что при возрастании k молекулярная вязкость в конечном счете становится больше наблюдаемой турбулентной вязкости, и спектр очень быстро спадает.

При вычислениях мы будем придерживаться следующих обозначений. Разложим скорость v в объеме V, на который производится нормировка, в ряд Фурье

$$v = \sum_k v_k e^{ikr} \quad \left(k_x = \frac{2\pi}{L_x}n_x, \ldots; \quad n_x, n_y, n_z - \text{целые числа}\right). \tag{2}$$

При этом $v_k = v^*_{-k}$, и число собственных колебаний в интервале от k до $k+\Delta k$ равно $4\pi k^2\Delta k V/(2\pi)^3$ [6] Тогда

$$\frac{\bar{v}^2}{2} = \frac{1}{2}\sum_k |v_k^2| = \frac{1}{2}\int 4\pi k^2\,dk\,\frac{V}{(2\pi)^3}|v_k^2| = \int F(k)\,dk \tag{3}$$

и, следовательно,

$$F(k) = (2\pi)^{-2}k^2 V|v_k^2|. \tag{4}$$

[4] *Prandtl L.* Strömungslehre. Braunschweig: Vieweg, 1942. 3, Aufl. S. 105.

[5] Наша величина v_0 отличается от величины v_0, приведенной в работе Вайцзеккера, на численный множитель порядка единицы.

[6] Такое разложение несколько уступает в наглядности традиционному разложению по синусам и косинусам, но более удобно для различного рода преобразований. Формально оно следует из краевых условий, согласно которым $v, \frac{\partial v}{\partial x}, \ldots$ в противоположных точках поверхности, ограничивающей объем V, принимают разные значения.

Так как $\operatorname{div} v = 0$, то

$$(v_k k) = 0. \tag{5}$$

Коэффициент молекулярной вязкости обозначим μ. Поскольку $\operatorname{div} v = 0$, то средние потери энергии на трение в предположении, что ограничивающая поверхность покоится, составляют

$$S = \mu\overline{(\operatorname{rot} v)^2} = \tag{6}$$

$$= \mu \sum_k |[v_k k]^2| = \mu \int F(k) 2k^2\, dk. \tag{7}$$

Если в некоторой достаточно протяженной области спектр изменяется по закону $F(k) \sim k^{-5/3}$, то полная энергия определяется самыми крупными элементами турбулентности. Можно предположить, например, что закон $k^{-5/3}$ выполняется вплоть до некоторого наименьшего k_0, после чего при меньших k сменяется законом $F(k) = 0$. Тогда

$$v_0^2 = 2\int_0^\infty F(k)\, dk = 2\int_{k_0}^\infty \frac{C}{k^{5/3}}\, dk = 3Ck_0^{-5/3}. \tag{8}$$

Следовательно,

$$C = \frac{v_0^2}{3} k_0^{2/3}$$

и

$$F(k) = \frac{v_0^2}{3}\frac{k_0^{2/3}}{k^{5/3}} \quad \text{при} \quad k \geqslant k_0, \tag{9}$$

$$|v_k^2| = \frac{v_0^2 k_0^{2/3} (2\pi)^3}{6\pi V k^{\frac{11}{3}}}. \tag{10}$$

Вайцзеккер рассмотрел потери энергии S_k части спектра с волновыми числами меньше k. Для соответствующих элементов турбулентности действие элементов турбулентности с меньшими длинами волн $(< 2\frac{\pi}{k})$ аналогично дополнительной вязкости. Следовательно, S_k в общем случае можно представить в виде

$$S_k = (\mu + \eta_k) \int_0^k F(k') 2k'^2\, dk', \tag{11}$$

где η_k — дополнительная турбулентная вязкость, создаваемая совместным действием всех элементов турбулентности с длинами волн меньше $2\frac{\pi}{k}$. По размерности величина η_k, как показал Прандтль, представляет собой произведение плотности, пути перемешивания и скорости, причем путь перемешивания по порядку величины сравним с диаметром соответствующего элемента турбулентности, а скорость элемента турбулентности задается выражением $v_0 = (k_0/k)^{1/3}$. Поэтому мы, следуя работе Вайцзеккера, положим

$$\eta_k = \varkappa \rho_k \int_k^\infty dk' \sqrt{\frac{F(k')}{k'^3}}, \tag{12}$$

где $\varkappa$ — числовой коэффициент.

Подынтегральное выражение по существу определяется из соображений размерности. Разумеется, можно было бы считать, что волны с k', мало отличающимся от k, входят в интеграл с несколько иными весами, чем волны с большими волновыми числами, т. е. что подынтегральное выражение зависит от безразмерного параметра k'/k. Однако вследствие единой формы спектра $F(k) \sim k^{-5/3}$ всеми неопределенностями в числовом множителе $\varkappa$ можно пренебречь и записать интеграл в виде (12). Там, где выполняется закон $k^{-5/3}$, формула (12) для дополнительной турбулентной вязкости безукоризненно точна, но на концах области применимости этого закона — там, где геометрия или молекулярное трение искажают спектр, формула (12) носит лишь приближенный характер. Впрочем, и на границе области применимости закона $k^{-5/3}$ формула (12) дает хорошее приближение, позволяющее по крайней мере качественно правильно учитывать вязкость.

Значение постоянной $\varkappa$ в формуле (12) должно быть однозначно выведено из уравнений гидродинамики. Во всех случаях, когда имеет смысл говорить о статистически изотропной турбулентности, постоянная $\varkappa$ принимает одно и то же значение и отнюдь не зависит от геометрии течения. Попытка получить значение этой важной постоянной из теоретических соображений предпринята в разделе 5. Там же показано, что турбулентную диссипацию энергии можно описать двойным интегралом вида $\int\limits_0^k dk' \ldots \int\limits_k^\infty dk'' \ldots$ с подынтегральным выражением, имеющим смысл энергии, которая переходит в единицу времени от волнового числа k' к волновому числу k (формула (89)). Этот интеграл сложнее упрощенного выражения (13), вытекающего из соотношений (11) и (12), но в дальнейшем эти соотношения вполне допустимо рассматривать как достаточно хорошее приближение. Итак, S_k можно представить в виде

$$S_k = \left(\mu + \rho\varkappa \int\limits_k^\infty dk'' \sqrt{\frac{F(k'')}{k''^3}}\right) \int\limits_0^k F(k') 2k'^2\, dk'. \tag{13}$$

Решающий шаг в работе Вайцзеккера состоит в утверждении о том, что при $k \ll k_0$ выражение (13) не должно зависеть от k:

$$S_k = S = \text{const} \quad (\text{при} \quad k \ll k_0) \tag{14}$$

(поскольку значительная доля полной энергии сосредоточена в длинноволновой области спектра, то энергия должна определяться «сквозным выражением», не зависящим от k).

Выражение (13) можно рассматривать как формулу, задающую спектр турбулентности $F(k)$. Из этой формулы при больших числах Рейнольдса должен следовать закон $k^{-5/3}$, а при дальнейшем возрастании k — отклонения от закона $k^{-5/3}$, обусловленные молекулярной вязкостью.

2

Вид спектра в области самых мелких элементов турбулентности

Положим $\frac{\mu}{\rho} = \nu$ и, продифференцировав (13) по k, получим:

$$\left(\frac{\nu}{\varkappa} + \int\limits_k^\infty dk' \sqrt{\frac{F(k')}{k'^3}}\right) F(k) k^2 = \sqrt{\frac{F(k)}{k^3}} \int\limits_0^k F(k') k'^2\, dk'. \tag{15}$$

Затем введем новые переменные x и w:

$$x = \ln\frac{k}{k_0}, \quad F(k) = F(k_0)e^{-w}, \quad w = w(x). \tag{16}$$

Соотношение (15) перейдет при этом в

$$e^{(7x-w)/2}\left(\frac{\nu}{\varkappa}\sqrt{\frac{k_0}{F_0}} + \int_x^\infty e^{-(w+x)/2}\,dx\right) = \int_0^\infty e^{3x-w}\,dx. \tag{17}$$

Постоянная $\frac{\nu}{\varkappa}\sqrt{\frac{k_0}{F_0}} = \frac{\nu k_0\sqrt{3}}{\varkappa v_0}$ (см. (9)) по существу представляет собой не что иное, как величину, обратную числу Рейнольдса полного течения, и поэтому всегда очень мала. Если бы само число Рейнольдса было мало, то течение не могло бы стать турбулентным. Продифференцировав выражение (17) еще раз, получим

$$\left(\frac{7}{2} - \frac{1}{2}\frac{dw}{dx}\right)\left(\frac{\nu}{\varkappa}\sqrt{\frac{k_0}{F_0}} + \int_x^\infty e^{-(w+x)/2}\,dx\right) = 2e^{-(w+x)/2}. \tag{18}$$

Интеграл $\int_x^\infty dx^{-(w+x)/2}$ в (18) можно вычислить приближенно, разложив $w(x)$ в окрестности x ($w(x_1) = w(x) + (x_1 - x)\frac{dw}{dx} + \ldots$) и оборвав разложение на втором члене. Так как экспонента убывает быстро, то приближение получается достаточно хорошим:

$$\int_0^\infty dx\, e^{-(w+x)/2} \approx 2\frac{e^{-(w+x)/2}}{1 + \frac{dw}{dx}}. \tag{19}$$

Подставляя в (18), получаем окончательно

$$\left(7 - \frac{dw}{dx}\right)\left(\frac{\nu}{2\varkappa}\sqrt{\frac{k_0}{F_0}}e^{-(w+x)/2} + \frac{1}{1 + \frac{dw}{dx}}\right) = 2. \tag{20}$$

Соотношение (20) позволяет тотчас же установить общий ход спектра. При не слишком больших x и w первым членом в сумме можно пренебречь, после чего (20) упростится и примет следующий вид

$$\left(7 - \frac{dw}{dx}\right) = 2\left(1 + \frac{dw}{dx}\right), \quad \text{или} \quad \frac{dw}{dx} = \frac{5}{3},$$

откуда в полном соответствии с теоремой Вайцзеккера

$$F(k) = F_0\left(\frac{k}{k_0}\right)^{-5/3}. \tag{21}$$

При больших x и w, наоборот, ведущим является первый член, поэтому

$$\frac{dw}{dx} = 7, \quad F \sim \text{const}\cdot k^{-7}. \tag{22}$$

Таким образом, в области самых малых элементов турбулентности спектр убывает очень быстро, а именно — как седьмая степень волнового числа.

Для решения уравнения (20) вычисления необходимы только в переходной области от (21) к (22). Так как при малых x, т. е. в области

$$1 \ll x \ll \frac{3}{4} \ln \frac{2\varkappa}{\nu} \sqrt{\frac{F_0}{k_0}}, \tag{23}$$

можно положить $w = \frac{5}{3}x$ (при этом не только (18), но и (17) будет выполняться с достаточной точностью), то соотношение (20) позволяет по известному значению w вычислять значение производной $\frac{dw}{dx}$ и тем самым шаг за шагом получать новые значения w при больших значениях x. При этом вычисления достаточно производить при каком-нибудь определенном значении постоянной, например, при $\frac{2\varkappa}{\nu}\sqrt{\frac{F_0}{k_0}} = a$. Значение w при любом другом значении b постоянной можно получить затем при помощи преобразования подобия

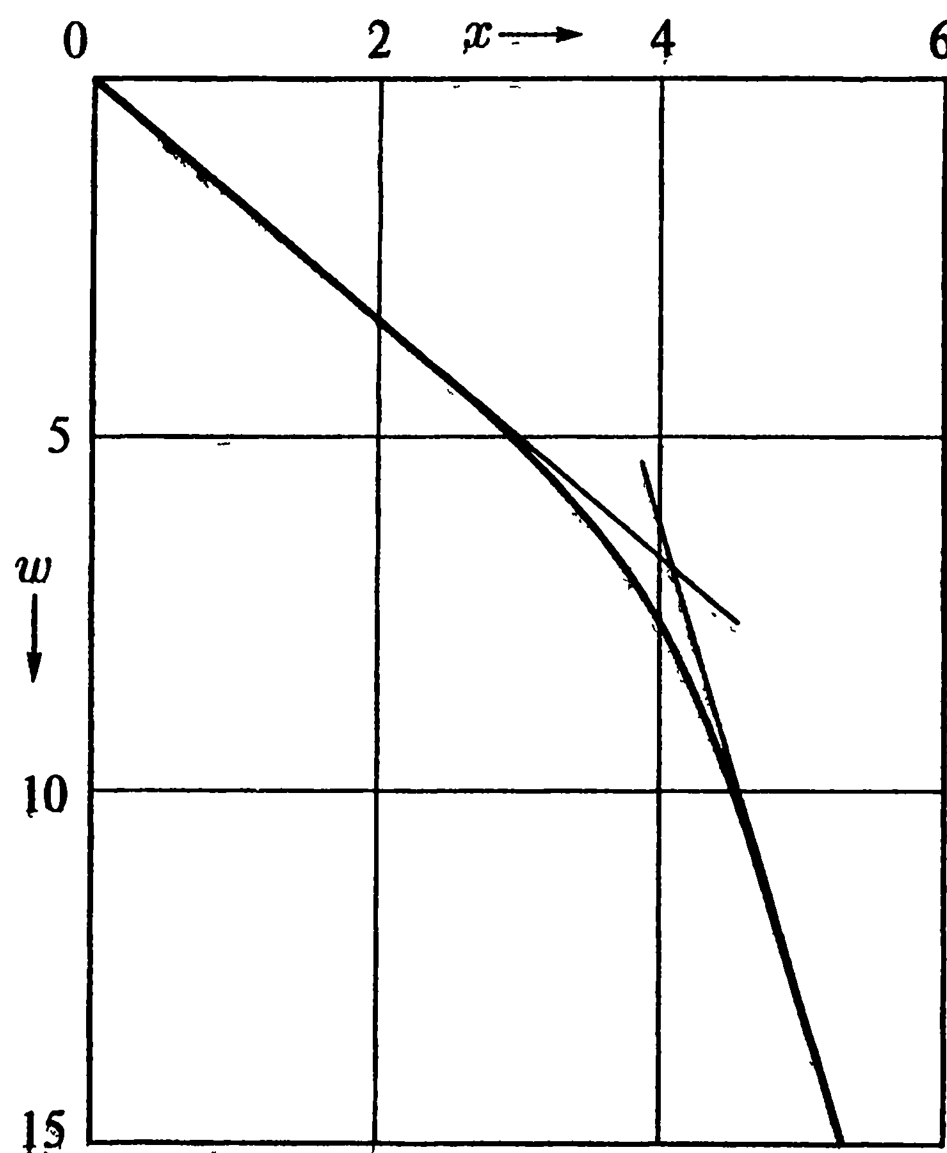


Рис. 1

$$w_b(x) = w_a\left(x + \frac{3}{4} \ln \frac{a}{b}\right) - \frac{5}{4} \ln \frac{a}{b}, \tag{24}$$

в чем нетрудно убедиться, подставляя (24) в (20) и (23).

На рис. 1 представлены результаты вычисления значений $w(x)$ при $\frac{2\varkappa}{\nu}\sqrt{\frac{F_0}{k_0}} = 1\,000$. Численное интегрирование показывает, что при этом значении постоянной $x > 5$ и

$$w(x) \approx 7x - 21{,}85. \tag{25}$$

Следовательно, в этой области применимости закона k^{-7} функция $w(x)$ представима в виде

$$w(x) = 7x + 3{,}0 - 4 \ln\left(\frac{\varkappa}{\nu}\sqrt{\frac{F_0}{k_0}}\right), \tag{26}$$

т. е.

$$F(k) = 0{,}0496\, \frac{F_0^3}{k_0^2} \left(\frac{\varkappa}{\nu}\right)^4 \left(\frac{k_0}{k}\right)^7. \tag{27}$$

Полезная интерполяционная формула, пригодная в обоих предельных случаях и дающая в переходной области не слишком большую ошибку, имеет вид

$$F(k) = F_0 \left(\frac{k_0}{k}\right)^{5/3} \left[1 + \left(\frac{k}{k_s}\right)^{8/3}\right]^{-2}. \tag{28}$$

Если $L_0 = \frac{\pi}{k_0}$ определить как «диаметр самых крупных элементов турбулентности» и в качестве числа Рейнольдса всего течения ввести

$$R_0 = \frac{\rho v_0 L_0}{\mu}, \tag{29}$$

то из (9), (27) и (29) получим

$$k_s = 0{,}16\, k_0 (R_0 \varkappa)^{3/4}. \tag{30}$$

Величину $L_s = \frac{\pi}{k_s}$ можно определить как «диаметр самых мелких элементов турбулентности». Тогда

$$L_s = 6{,}25 \cdot L_0 (R_0 \varkappa)^{-3/4}. \tag{31}$$

Соотношения (9), (28) и (30) описывают вид спектра при любых k. Правда, в реальных течениях ход спектра при малых k ($k \sim k_0$) должен быть другим, так как там играет роль геометрия эксперимента, т. е. вид решетки, при помощи которой создается турбулентность. Разумного согласия с экспериментом удается достичь введением величины k_0, выбранной так, чтобы в области применимости закона $k^{-5/3}$ (следовательно, при $k_s \gg k \gg k_0$) была справедлива формула

$$F(k) = \frac{v_0^2}{3k_0} \left(\frac{k_0}{k} \right)^{5/3}. \tag{32}$$

Определенная таким образом величина k_0 в этом случае уже не содержит непосредственно каких-либо сведений о ходе спектра при самых малых значениях k. Тем не менее в общем случае при $k \sim k_0$ спектр сильно отличается от закона $k^{-5/3}$.

При $k \gg k_s$ спектр сохраняет вид k^{-7} не при любых k: как показывают известные эксперименты Бюргерса[7], весьма правдоподобно, что при достаточно малых числах Рейнольдса турбулентные движения вообще не возникают. С другой стороны, закон k^{-7} спадает столь быстро, что область $k \gg k_s$ практически не играет никакой роли. Несколько большая ошибка, особенно в переходной области, возникает из-за приближенного характера формулы (13), но применять сейчас гораздо более сложные соотношения из раздела 5 для решения поставленной задачи было бы преждевременным. Заметим лишь, что точные соотношения привели бы к другим числовым коэффициентам в (27), (30).

Для сравнения с экспериментом необходимо распределение энергии по волновым числам в некотором направлении, например, по k_x, так как Симмонс[8] и Драйден[9] измерили спектры по временны́м флуктуациям скорости в потоке воздуха, продувавшегося с постоянной относительно v_0 скорости U в точке измерения. Такой спектр имеет различный вид в зависимости от того, рассматриваем ли мы разложение Фурье для v_x или v_y. Для сравнения с экспериментом нам пока необходим спектр для v_x. Однако мы намереваемся вывести и спектр для v_y, так как он понадобится нам в дальнейшем при вычислении корреляционных функций. Так как $(v_k k) = 0$ (см. (5)), то

$$\bar{v}_{kx}^2 = \frac{v_k^2}{2} \left(1 - \frac{k_x^2}{k^2} \right). \tag{33}$$

[7] *Burgers J. M.* Verh. Kgl. Nied. Akad. Wiss., 1939, **17**, № 2, 1; 1940, **18**, № 1, 1.

[8] *Simmons L. F. G., Salter C.* Proc. Roy. Soc., 1938, A **165**, 73.

[9] *Dryden H. L., Schubauer G. B., Mock W. C., Skramstad H. K.* Nat. Adv. Comm. Aeron., 1938, № 581; *Dryden H. L.* Proc. V Intern. Congr. Appl. Mech. Cambridge (Mass.), 1938. P. 362.

Обозначим спектр величины v_x по k_x через $F_x(k_x)$. Тогда

$$F_x(k_x) = \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y\, dk_z}{4\pi k^2} \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k_x^2}{k^2}\right) F(k) = \frac{1}{4} \int\limits_{k_x}^{\infty} \frac{dk}{k^3} (k^2 - k_x^2) F(k). \tag{34}$$

Аналогичным образом спектр для v_y можно представить в виде

$$F_y(k_x) = \iint\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_y\, dk_z}{4\pi k^2} \frac{1}{2}\left(1 - \frac{k_y^2}{k^2}\right) F(k) = \frac{1}{8} \int\limits_{k_x}^{\infty} \frac{dk}{k^3} (k^2 + k_x^2) F(k). \tag{35}$$

Из (34) и (35) получаем:

а) при $k_0 \ll k \ll k_s$

$$F(k) = F_0 \left(\frac{k_0}{k}\right)^{5/3},$$

следовательно,

$$F_x(k_x) = \frac{9F_0}{110} \left(\frac{k_0}{k_x}\right)^{5/3} \quad \text{и} \quad F_y(k_x) = \frac{6F_0}{55} \left(\frac{k_0}{k_x}\right)^{5/3}; \tag{36}$$

б) при $k \gg k_s$

$$F(k) = F_0 \frac{k_0^{5/3} k_s^{16/3}}{k^7}, \qquad F_x(k_x) = \frac{F_0}{126} k_0^{5/3} k_s^{16/3} k_x^{-7}, \qquad F_y(k_x) = \frac{2F_0}{63} k_0^{5/3} k_s^{16/3} k_x^{-7}. \tag{37}$$

В качестве полезных интерполяционных формул (дающих в переходной области несколько большую точность, чем (28)) можно воспользоваться выражениями

$$F_x(k_x) = \frac{9F_0}{110} \left(\frac{k_0}{k_x}\right)^{5/3} \left[1 + \left(\frac{k_x}{k_s^{xx}}\right)^{8/3}\right]^{-2}, \tag{38}$$

где

$$k_s^{xx} = 0{,}645 k_s, \tag{39}$$

и

$$F_y(k_x) = \frac{6F_0}{55} \left(\frac{k_0}{k_x}\right) \frac{5}{3} \left[1 + \left(\frac{k_x}{k_s^{yx}}\right)^{8/3}\right]^{-2}, \tag{40}$$

где

$$k_s^{xy} = 0{,}793 k_s. \tag{41}$$

Прежде чем переходить к подробному сравнению с экспериментом, необходимо выяснить, при каких критических числах Рейнольдса происходит переход от закона $k^{-5/3}$ к закону k^{-7}, или, если угодно, переход от собственно турбулентного движения к ламинарному движению. Критическим числом Рейнольдса в этом случае можно считать, например, выражение

$$R_s = \frac{\rho v_s L_s}{\mu}, \tag{42}$$

где, как и в работе Вайцзеккера, $v_s = v_0\left(\frac{k_0}{k_s}\right)^{1/3}$. Тогда из (29), (30) и (31) мы получаем

$$R_s = \frac{10,2}{\varkappa}. \tag{43}$$

К обсуждению численного значения постоянной $\varkappa$ мы еще вернемся. Пока же отметим, что, как и следовало ожидать из общих соображений подобия, переход происходит при определенном значении числа Рейнольдса.

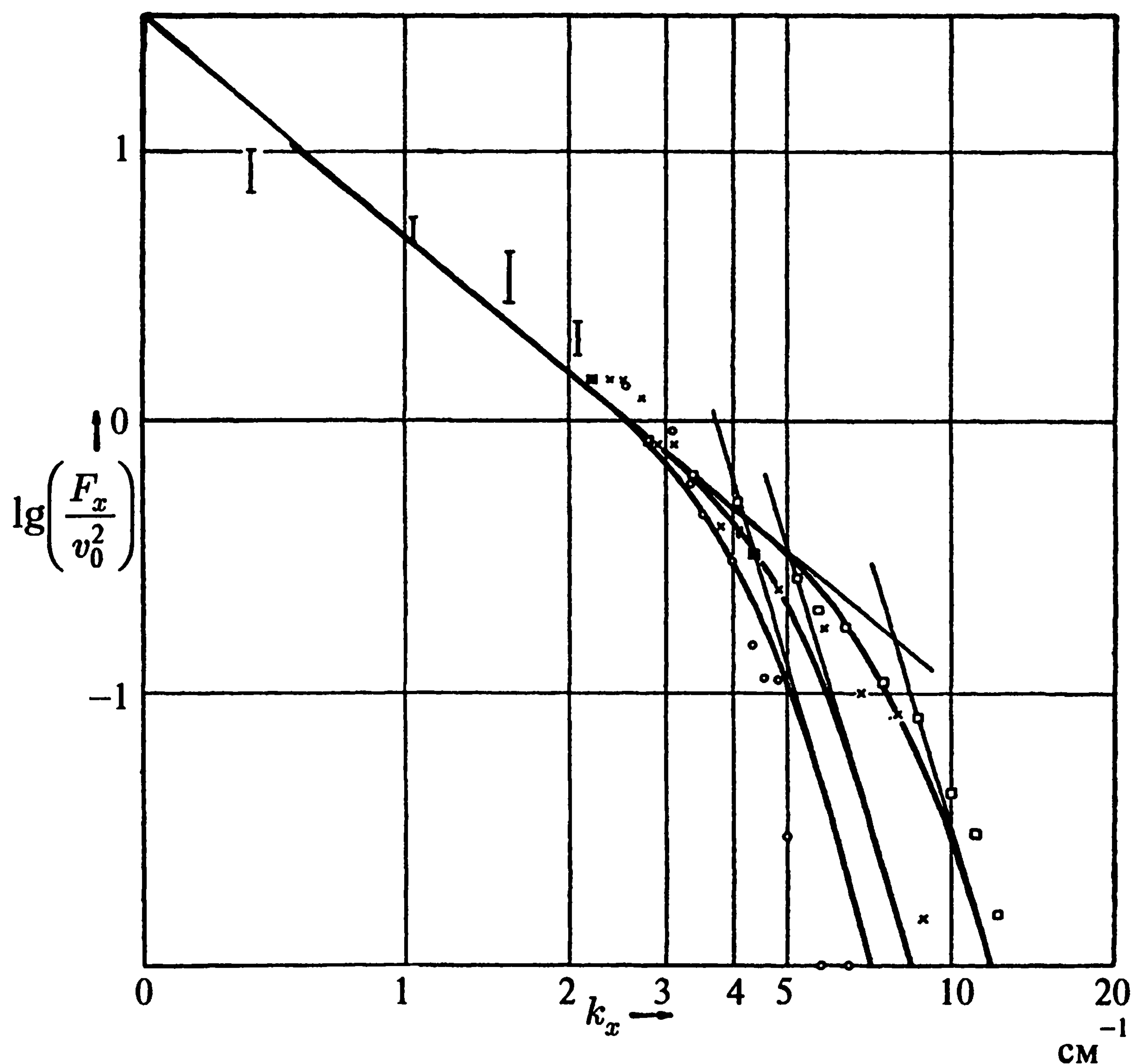


Рис. 2

На рис. 2 представлены результаты сравнения измерений спектра $F_x(k_x)$, произведенных Симмонсом[10], с теорией. Речь идет об измерениях интенсивности воздушного потока, продувавшегося со скоростями $U = 456$ см/с (кружки), 608 см/с (крестики) и 1 060 см/с (квадраты) в точке измерения. Турбулентность создавалась при помощи решетки с шагом 7,6 см. Измерения производились на расстоянии 2,1 см за решеткой. Результаты отдельных измерений Симмонса нанесены на график только в правой части рис. 2, а на левой половине вертикальными отрезками указаны лишь ошибки соответствующих измерений. По оси абсцисс отложены (в логарифмическом масштабе) волновые числа k в см$^{-1}$, по оси

[10] *Simmons L. F. G., Salter C.* Op. cit.

ординат (также в логарифмическом масштабе) — значения $F_x(k_x)$ в произвольных единицах. Если предположить, что $\frac{U}{v_o}$ во всех трех сериях экспериментов принимает одно и то же значение, как это было установлено измерениями Тейлора, то при надлежащем выборе отношения $\frac{U}{v_o}$ получаются три кривые, изображенные на рис. 2. Качественно эти кривые дают хорошее согласие с экспериментальными точками Симмонса, в частности, довольно точно передают ход результатов измерений в коротковолновой части спектра. Тем не менее у отдельных точек отклонения от кривых довольно значительны. Из рис. 2 видно, что область применимости закона $k^{-5/3}$ настолько мала, что надежная проверка не представляется возможной. Объясняется это малостью числа Рейнольдса R_0. При $k = 1$ см$^{-1}$ диаметр элементов турбулентности составляет 3 см, т. е. примерно половину шага решетки. В этой области турбулентность еще не полностью изотропна, и поэтому закон $k^{-5/3}$ не может выполняться. Но уже при $k = 4$ см$^{-1}$ становится заметно влияние молекулярной вязкости, интенсивность сильно падает. Аналогичные измерения Драйдена[11], охватывающие обширную область спектра, также проведены при столь малых числах Рейнольдса, что это не позволяет проверить, выполняется ли закон $k^{-5/3}$. Было бы желательно поэтому провести такие же измерения при гораздо больших числах Рейнольдса. Хорошее согласие теоретических кривых с экспериментальными точками позволяет оценить величину отношения $\frac{U}{v_o}$. Оно оказывается равным $\frac{U}{v_o} = 53\varkappa$, если за L_0 принять шаг решетки. Это значение хорошо согласуется с измерениями отношения $\frac{U}{v_o}$ в аналогичных экспериментах[12], если положить $\varkappa \approx 0{,}5$.

Другой более точный способ определения постоянной $\varkappa$ — исследование затухания турбулентности со временем, которое чисто теоретически было проанализировано Тейлором[13]. Для полных потерь энергии S на 1 см^3 за 1 с из (9), (13) и (14) получаем

$$S = \rho\varkappa\frac{\sqrt{3}}{8}v_0^3k_0. \tag{44}$$

Следовательно, затухание величины v_0 со временем должно удовлетворять уравнению

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{v_0^2}{2}\right) = -\varkappa\frac{\sqrt{3}}{8}v_0^3k_0, \tag{45}$$

которому удовлетворяет решение[14]

$$v_0(t) = \frac{v_0(0)}{1 + \frac{\sqrt{3}}{8}\varkappa k_0 v_0(0)t}. \tag{46}$$

[11] *Dryden H. L., Schubauer G. B., Mock W. C., Skramstad H. K.* Op. cit.; *Dryden H. L.* Op. cit.

[12] *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc., 1938, **A 164**, 486.

[13] *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc., 1938, **A 164**, 486.

[14] *Примечание при корректуре.* Эта зависимость основана на предположении $k_0 = \text{const}$, что заведомо неверно при больших временах. Проблема затухания исследована более подробно в работе *Heisenberg W.* Proc. Roy. Soc., 1948, **A 195**, 402–406.

В работе Тейлора[15], который по существу вывел то же уравнение, сообщается об измерениях Симмонса, обнаружившего, что $\frac{U}{v_0(t)}$ — функция от $t = \frac{x}{U}$ (x — расстояние от точки, в которой производится измерение до решетки). Из (46) следует, что

$$\frac{U}{v_0(t)} = \frac{U}{v_0(0)} + \frac{\sqrt{3}}{8}\varkappa\pi\frac{x}{L_0} = \frac{U}{v_0(0)} + 0{,}68\varkappa\frac{x}{L_0}. \tag{47}$$

Если положить $v_0 = u'\sqrt{3}$ (по Тейлору $u' = \sqrt{\bar{v}_x^2}$) и отождествить L_0 с шагом решетки, то из измерений Тейлора мы получим $\varkappa = 0{,}85$, а из соответствующих измерений Драйдена — несколько меньшее значение. Однако из-за неопределенности значения L_0 значение $\varkappa$ также содержит примерно 50-процентную неопределенность.

3

Корреляционные функции

Тейлор[16] и Карман[17] исследовали корреляции между скоростями в двух точках, находящихся на заданном расстоянии друг от друга. Две корреляционные функции $R_1(x)$ и $R_2(x)$, играющие главную роль, определены следующим образом:

$$R_1(x) = \frac{v_x(P_1)v_x(P_2)}{\bar{v}_x^2}, \quad R_2(x) = \frac{\overline{v_y(P_1)v_y(P_2)}}{\bar{v}_y^2}, \tag{48}$$

где точка P_2 отстоит от точки P_1 на расстоянии x в направлении оси x.

Тейлор показал, что эти функции весьма просто связаны со спектрами:

$$R_1(x) = \frac{\int_0^\infty dk_x F_x(k_x)\cos k_x x}{\int_0^\infty dk_x F_x(k_x)}, \quad R_2(x) = \frac{\int_0^\infty dk_x F_y(k_x)\cos k_x x}{\int_0^\infty dk_x F_y(k_x)}. \tag{49}$$

Соотношения (34) и (35) позволяют преобразовать (49) к виду

$$\begin{aligned} R_1(x) &= \frac{3\int_0^\infty dkF(k)(\sin kx - kx\cos k_x)k^{-3}x^{-3}}{\int_0^\infty dkF(k)}, \\ R_2(x) &= \frac{3}{2}\frac{\int_0^\infty dkF(k)(k^2x^2\sin kx + kx\cos kx - \sin kx)k^{-3}x^{-3}}{\int_0^\infty dk_x F(k)}. \end{aligned} \tag{50}$$

---

[15] *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc., 1938, **A 164**, 486.

[16] *Taylor G. J.* Proc. Roy. Soc., 1935, **A 151**, 421; 1936, **A 156**, 307; 1938, **A 164**, 15; 1938, **A 164**, 476.

[17] *Karman Th. von.* Op. cit.

Из этих выражений непосредственно следует правильность соотношения Кармана

$$R_2 = R_1 + \frac{x}{2}\frac{dR_1}{dx}. \tag{51}$$

В обоих предельных случаях (при $x \ll \frac{1}{k_s}$ и $\frac{1}{k_s} \ll x \ll \frac{1}{k_0}$) формулы (50) позволяют приближенно вычислить $R_1(x)$ и $R_2(x)$. При $x \ll \frac{1}{k_s}$ подынтегральные выражения целесообразно разложить по степеням x. Первые члены разложения приводят к величине

$$\bar{k}^2 = \frac{\int\limits_0^\infty dkF(k)k^2}{\int\limits_0^\infty dkF(k)}, \tag{52}$$

которую нетрудно вычислить из соотношений (13), (44) и (29):

$$\bar{k}_2 = \frac{\sqrt{3}}{8\pi}\varkappa R_0 k_0^2. \tag{53}$$

В результате при $x \ll \frac{1}{k_s}$ мы получаем

$$R_1(x) = 1 - \frac{x^2\bar{k}^2}{10} + \ldots, \tag{54}$$

$$R_2(x) = 1 - \frac{x^2\bar{k}^2}{5} + \ldots . \tag{55}$$

Тейлор задал длину λ соотношением

$$\lambda^2 = \frac{5}{\bar{k}^2} \tag{56}$$

и принял ее за масштаб самых мелких элементов турбулентности. Подставляя $\bar{k}^2$ из (53), приходим к

$$\lambda = 2{,}71\frac{L_0}{\sqrt{R_0\varkappa}} = 0{,}434 L_s (R_0\varkappa)^{1/4}. \tag{56'}$$

Следует подчеркнуть, что λ не совпадает с величиной L_s (см. (31)), принятой нами за диаметр самых мелких элементов турбулентности, и λ зависит от L_0 и v_0 иначе, чем L_s. Сравнение формул (31) и (56) показывает, что характерные масштабы удовлетворяют неравенству $L_s \ll \lambda$.

Противоположный предельный случай $\frac{1}{k_s} \ll x \ll \frac{1}{k_0}$ получается из (50):

$$\begin{aligned} R_1(x) &= 1 - 0{,}643(k_0x)^{2/3} + \ldots, \\ R_2(x) &= 1 - 0{,}858(k_0x)^{2/3} + \ldots . \end{aligned} \tag{57}$$

Первые члены этих разложений не зависят от конкретного вида спектра в окрестности k_0. Вид спектра в окрестности k_0 становится существенным лишь при $x \sim \frac{1}{k_0}$,

но при этих значениях x задачу уже невозможно решить чисто статистическими методами. Итак, формулы (54) и (57) дают полное описание корреляций до тех пор, пока они следуют из статистически изотропной турбулентности.

Формулы (54) и (57) отчетливо показывают также, что не во всех течениях вид корреляционной функции остается неизменным и что при изменениях параметров внутренняя и внешняя часть функции подвергается различным преобразованиям подобия. На это обращал особое внимание Тейлор[18], полемизируя с допущением иного рода, принятым Карманом[19].

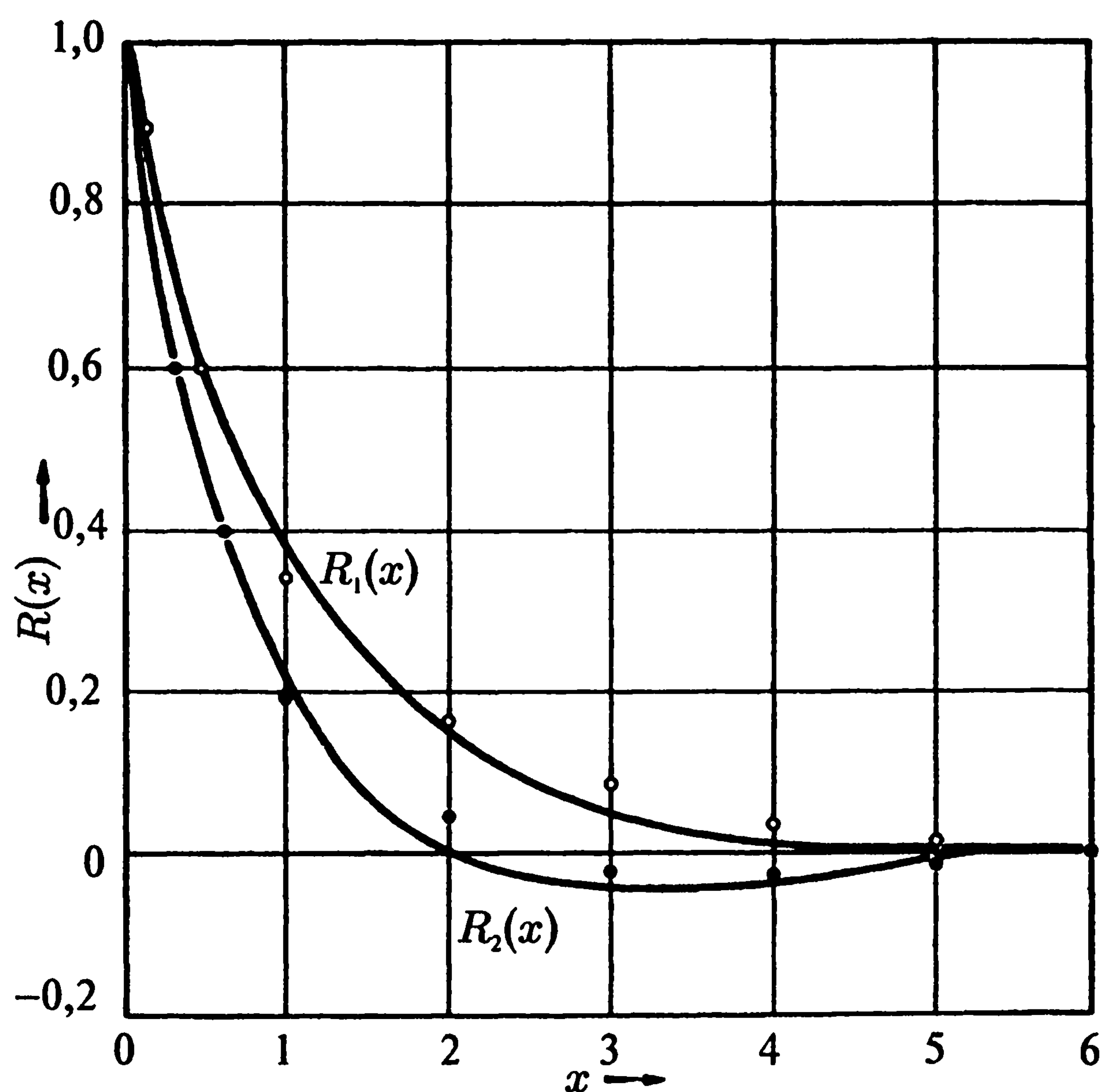


Рис. 3

Для сравнения с экспериментом на рис. 3 представлены экспериментальные $R_1(x)$ и $R_2(x)$, полученные Симмонсом (соответственно, кружки и точки), и теоретические кривые, вычисленные по точной формуле (50). Величина L_0 отождествлена при этом с шагом решетки, а λ вычислена по спектру при $U = 1\,060$ см/с. При малых значениях x экспериментальные точки весьма точно согласуются с теоретическими кривыми, по существу точнее, чем можно было бы ожидать, учитывая неопределенность в выборе L_0. Начиная с $xk_0 \sim 1$, отклонение экспериментальных точек от теоретических становится заметным, как и следовало ожидать, исходя из способа, которым были выведены кривые. Действительно, вид кривых при больших значениях x зависит от того, как ведет себя спектр в окрестности k_0, в то время как наши формулы не передают и не могут передавать особенности поведения спектра вблизи k_0, но сами по себе отклонения от теоретических кривых при больших значениях x малы.

18) *Taylor G. J.* J. Aeron. Sci., 1937, **4**, 311.

19) *Karman Th. von.* Op. cit.

4

Флуктуации давления

Исследуя диффузию в турбулентном потоке воздуха, Тейлор[20] установил зависимость между корреляционной функцией, определяющей диффузию, и средним квадратичным градиента давления. Поэтому мы хотим проанализировать среднее квадратичное флуктуаций давления в рамках предлагаемой нами теории.

По аналогии с (2) давление можно разложить в ряд Фурье

$$p = \sum_k p_k e^{ikr}, \quad p_{-k} = p_k^*, \tag{58}$$

при этом основное уравнение гидродинамики

$$\dot v = -(v\nabla)v - \frac{1}{\rho}\nabla p + \frac{\mu}{\rho}\Delta v$$

переходит в уравнение

$$\dot v_k = -\sum_{k'} i(v_{k'}k)v_{k-k'} - \frac{ik}{\rho}\,p_k - \frac{\mu}{\rho}\,k^2 v_k. \tag{59}$$

Так как $(v_k k) = 0$, то

$$\dot v_k = -\sum_{k'} i(v_{k'}k)\left[v_{k-k'} - \frac{k}{k^2}\,(v_{k-k'}k) - \frac{\mu}{\rho}\,k^2 v_k\right]. \tag{60}$$

$$p_k = -\frac{\rho}{k^2}\sum_{k'}(v_{k'}k)(v_{k-k'}k).$$

Для средних квадратичных давления и градиента давления получаем:

$$\bar p^2 = \sum_k |\bar p_k^2|, \quad \overline{\operatorname{grad}^2 p} = \sum_k k^2 |\bar p_k^2|. \tag{61}$$

Рассмотрим сначала более подробно второе из этих средних:

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = \sum_k \sum_{k'} \sum_{k''} \frac{\rho^2}{k^2}\,\overline{(v_{k'}k)(v_{k-k'}k)(v_{k''}k)(v_{k-k''}k)}. \tag{62}$$

Черта сверху — знак усреднения — означает в данном случае просто среднее по времени. При вычислении средних типа (62) необходимо в той или иной форме принять «гипотезу о беспорядке» в турбулентном движении. Например, можно исходить из того, что амплитуды v_k со временем претерпевают флуктуации вокруг значений, задаваемых соотношениями (10) или (28), так, что среднее по времени $\overline{v_k v_{-k}}$ определяется просто спектром (28). Фазы величин v_k со временем принимают все возможные значения, причем все значения встречаются одинаково

[20] *Taylor G. J.* J. Aeron. Sci., 1937, **4**, 311.

часто. Если считать, что при различных волновых числах фазы статистически полностью независимы, то при усреднении произведения четырех множителей

$$\overline{v_{k_1} v_{k_2} v_{k_3} v_{k_4}}$$

останутся члены с попарно равными по абсолютной величине, но противоположными по знаку волновыми числами, т. е. члены вида

$$v_{k_1} v_{-k_1} v_{k_2} v_{-k_2},$$

а их средние можно заменить произведением средних квадратов амплитуд:

$$\overline{v_{k_1} v_{-k_1} v_{k_2} v_{-k_2}} = \overline{v_{k_1} v_{-k_1}} \cdot \overline{v_{k_2} v_{-k_2}}. \tag{63}$$

Однако в действительности между фазами с различными волновыми числами существуют статистические корреляции, так как волны взаимодействуют между собой. В разделе 5 мы попытаемся оценить эти корреляции для одного простого случая, а пока, несмотря на их существование, предположим, что в сумму вида (62) наибольший вклад вносят члены вида (63), так как их среднее уже в первом приближении, без какого бы то ни было предположения относительно поведения волн во времени, отлично от нуля, а средние других членов получаются отличными от нуля лишь при учете более тонкого взаимодействия различных волн. Итак, мы считаем, что разумное приближение можно получить, удерживая в (62) только члены вида (63). Имеем:

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = 2\rho^2 \sum_{k',k''} \frac{(v_{k'}k'')(v_{-k'}k'')(v_{k''}k')(v_{-k''}k')}{(k'-k'')^2}. \tag{64}$$

При усреднении по направлениям векторов v_k (мы предполагаем, что все направления, перпендикулярные волновому вектору k, равновероятны для v_k) удобно воспользоваться соотношением

$$\overline{(v_k a)(v_{-k} b)} = \frac{|\bar{v}_k^2|}{2}\left[ab - \frac{(ak)(bk)}{k^2}\right]. \tag{65}$$

В результате усреднения получаем

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = \frac{\rho^2}{2} \sum_{k',k''} |\bar{v}_{k'}^2||\bar{v}_{k''}^2| \frac{\left[k'^2 k''^2 - (k'k'')^2\right]^2}{(k'-k'')^2}. \tag{66}$$

Подстановка $(k'k'') = k'k''\zeta$ позволяет произвести интегрирование по ζ и получить

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = \frac{\rho^2}{2} \sum_{k',k''} |\bar{v}_{k'}^2||\bar{v}_{k''}^2| k'k''\psi\left(\frac{k'}{k''}\right), \tag{67}$$

где

$$\psi(s) = \psi\left(\frac{1}{s}\right) = \frac{1}{16s^2}\left[-1 + \frac{11}{3}s^2 + \frac{11}{3}s^4 - s^6 + \frac{(1-s^2)^4}{2s} \ln \frac{1+s}{|1-s|}\right]. \tag{68}$$

При $0 \leqslant s \leqslant 1$ можно воспользоваться следующим приближением:

$$\psi(s) \approx \frac{8s}{15}\left(1 - \frac{3}{7}s^2 + \frac{s^4}{21}\right). \tag{69}$$

Преобразуя суммы в интегралы и подставляя в (67) спектр (28), получаем

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = \frac{2}{9}\rho^2 v_0^4 k_0^{4/3} \int\limits_{k_0}^{\infty} \frac{dk'}{k'^{2/3}} \int\limits_{k_0}^{\infty} \frac{dk''}{k''^{2/3}} \frac{\psi\left(\frac{k'}{k''}\right)}{\left[1+\left(\frac{k'}{k_s}\right)^{8/3}\right]^2 \left[1+\left(\frac{k''}{k_s}\right)^{8/3}\right]^2}. \tag{70}$$

Из (70) видно, что при малых значениях k интегралы сходятся и, следовательно, при $k = 0$ интегрирование можно выполнить без сколько-нибудь значительных погрешностей. Это свидетельствует о том, что $\overline{\operatorname{grad}^2 p}$ действительно определяется характером спектра при больших k, т. е. *самыми мелкими элементами турбулентности*. Вычислив $\bar{p}^2$, мы пришли бы к противоположному выводу — о том, что интеграл при малых значениях k расходится и, следовательно, полностью определяется самыми крупными элементами турбулентности. Таким образом, значение $\bar{p}^2$ вообще не может быть вычислено предлагаемым нами методом, поскольку, во-первых, при малых k вид спектра зависит от геометрии эксперимента, и, во-вторых, при рассмотрении самых крупных элементов турбулентности нет оснований учитывать только средние типа (63), так как геометрия системы самых крупных вихрей заведомо оказывает определенное влияние на соотношения фаз.

Преобразуем теперь (70) к следующему виду:

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = \frac{2}{9}\rho^2 v_0^4 k_0^{4/3} k_s^{2/3} \int\limits_0^{\infty} \frac{d\zeta}{\zeta^{2/3}} \int\limits_0^{\infty} \frac{d\eta}{\eta^{2/3}} \frac{\psi\left(\frac{\zeta}{\eta}\right)}{\left[1+\zeta^{8/3}\right]^2 \left[1+\eta^{8/3}\right]^2}. \tag{71}$$

Вычисление двойного интеграла в правой части графическим методом дает его приближенное значение 0,763. Следовательно, (71) можно записать в виде

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = 0{,}17\rho^2 v_0^4 k_0^{4/3} k_s^{2/3} = \tag{72}$$

$$= 0{,}05\rho^2 v_0^2 k_0^2 \sqrt{R_0 \varkappa}. \tag{73}$$

Тейлор[21)] высказал предположение о том, что $\overline{\operatorname{grad}^2 p}$ и $\overline{\rho^2 v_0^2 \left(\frac{\partial v}{\partial x}\right)^2}$ должны быть величинами одного порядка, а именно $\rho^2 v_0^4 k_0^{2/3} k_s^{4/3}$. Однако из (72) видно, что $\overline{\operatorname{grad}^2 p}$ в действительности должен быть значительно меньше — тем меньше, чем больше отношение $\frac{k_s}{k_0}$. Поэтому введенная Тейлором характерная длина λ_η, задаваемая соотношением

$$\overline{\left(\frac{\partial p}{\partial y}\right)^2} = 2\rho^2 \frac{\left(\bar{v}_y^2\right)^2}{\lambda_\eta^2}, \tag{74}$$

$$\overline{\operatorname{grad}^2 p} = \frac{2}{3}\rho^2 \frac{v_0^4}{\lambda_\eta^2}, \tag{75}$$

при больших числах Рейнольдса должна быть значительно больше характерной длины λ, задаваемой соотношением (55). Из (75), (73) и (56) получаем

$$\lambda_\eta = \lambda \cdot 0{,}42\sqrt[4]{R_0 \varkappa}. \tag{76}$$

Этот результат плохо согласуется с экспериментальными данными. Так, Тейлор на основании эксперимента, проведенного Симмонсом вслед за аналогичным

21) *Taylor G. J.* J. Aeron. Sci., 1937, **4**, 311.

экспериментом Шубауера[22], приводит значение $\frac{\lambda_n}{\lambda} = 0{,}5$, причем из условий эксперимента следует, что $\sqrt[4]{R_0\varkappa} \approx 3{,}9$. Естественно возникает вопрос, не следует ли искать причину расхождения зависимости (72) с экспериментом в том, что при усреднении были учтены только члены вида (63). Нетрудно видеть, что хотя учет других членов может сказаться на величине числового коэффициента в (72), на зависимости λ_η от k_0 и k_s, т.е. на зависимости λ_η от $R_0\varkappa$, пренебрежение всеми членами, кроме членов типа (63), никак не сказывается. Действительно, как показывает соотношение (10), в правую часть формулы (62) должен входить нормирующий множитель $v_0^4 k_0^{4/3}$. При усреднении этот множитель дополняет множитель размерности $k^{2/3}$, который, очевидно, по порядку величины не превышает $k_s^{2/3}$ и также непременно входит в правую часть, так как соответствующий интеграл по k расходился бы именно как $k^{2/3}$, если бы при $k \sim k_s$ спадание спектра не происходило бы по закону k^{-7}. Остается еще одна возможность. Она состоит в том, что учет одних лишь членов типа (63) приводит к занижению численного коэффициента в (72). Однако трудно представить, чтобы правильное выражение давало бы более чем десятикратное увеличение значений, без чего было бы невозможно интерпретировать экспериментальные данные.

Возможно, что возникающее противоречие удастся разрешить следующим образом. Главный вклад в $\overline{\operatorname{grad}^2 p}$ вносят волновые числа порядка k_s, т.е. элементы турбулентности, диаметр которых меньше миллиметра. В эксперименте Симмонса поток воздуха подогревался раскаленной проволочкой длиной 20 см, натянутой поперек канала, и распределение нагретого воздуха измерялось на некотором расстоянии от проволочки. Для определения λ_η необходимы именно малые расстояния (от 5 до 15 см). Напрашивается предположение, что раскаленная проволочка создавала в потоке воздуха небольшие вихревые дорожки и дополнительную турбулентность, причем диаметр элементов турбулентности составлял несколько миллиметров. Иначе говоря, проволочка повышала интенсивность турбулентности именно в той области спектра, на которую $\overline{\operatorname{grad}^2 p}$ оказывает наиболее сильное влияние. В непосредственной близости от проволочки дополнительная турбулентность должна быть гораздо больше первоначальной турбулентности в той же области длин волн. Однако дополнительная турбулентность быстро затухает, и поэтому оценить, объясняет ли она расхождение между (76) и экспериментальными значениями λ_η, довольно трудно.

5

Диссипация энергии при нормальной изотропной турбулентности

Изложенные в предыдущих разделах исследования тесно связаны с основной проблемой статистической теории турбулентности — определением диссипации энергии при нормальном распределении энергии, т.е. определением постоянной $\varkappa$ в (12). При решении этой проблемы молекулярным трением можно полностью пренебречь. Тогда уравнения гидродинамики примут следующий вид:

$$\dot{v} = -(v\nabla)v - \frac{1}{\rho}\nabla p, \qquad \nabla v = 0.$$

В качестве нормировочного объема выберем подходящий объем в жидкости, который перемещается вместе с жидкостью, например, со скоростью, средней

[22] *Schubauer G. B.* Techn. Rep., Nat. Adv. Comm. Aero., Wash., 1935. № 524.

по объему. Итак, мы предполагаем, что объем движется со скоростью u. Тогда (60) переходит в

$$\dot{v}_k = -i \sum_{k'} (v_{k'} k) \left[v_{k-k'} - \frac{k}{k_2} (v_{k-k'} k) \right] + i(uk) v_k. \tag{77}$$

Чтобы вычислить диссипацию энергии, необходимо знать, как изменяется со временем интенсивность $|v_k^2|$ собственных колебаний с определенным волновым числом (или, точнее, суммы таких квадратов амплитуд по достаточно узкой области спектра Δk : $\sum\limits_k^{k+\Delta k} |v_k^2|$). Из (77) видно, что для этого в свою очередь необходимо знать средние по времени произведений типа

$$\overline{v_{k_1} v_{k_2} v_{k_3}}, \tag{78}$$

где $k_3 = -k_1 - k_2$. Вследствие статистически однородного распределения фаз эти средние обратились бы в нуль, если бы не статистические корреляции между фазами с различными k, обусловленные взаимодействием волн, о чем уже говорилось в разделе 4. Для получения этих корреляций необходимо каким-то образом учесть в уравнениях влияние, оказываемое на волну с заданным k волнами с другими k, например, представить одну из трех амплитуд в (78) в виде интеграла по времени от $\dot{v}_k$, а $\dot{v}_k$ в свою очередь представить в виде суммы двух других v_k из уравнения (77). В результате мы получим произведение четырех амплитуд v_k, которые, однако, следует брать при различных значениях t. Соображения, изложенные в разделе 4, применимы к таким произведениям. Следовательно, первое приближение мы получим, если учтем только произведения типа (63). Разумеется, использованный нами прием можно обобщить и попытаться вычислять средние от произведений четырех сомножителей, сводя их к произведениям шести сомножителей, и т. д. Однако такие вычисления были бы слишком громоздкими, к тому же старшие члены дают малый вклад, и мы ограничимся лишь первым шагом.

Для вычислений нам понадобятся средние типа

$$\overline{v_k(t) v_{-k}(t+\tau)},$$

поэтому мы введем величину

$$R(t,\tau) = \frac{\sum\limits_k^{k+\Delta k} v_k\left(t + \frac{\tau}{2}\right) v_{-k}\left(t - \frac{\tau}{2}\right)}{\sum\limits_k^{k+\Delta k} \overline{v_k v_{-k}}}. \tag{79}$$

Суммирование в определении $R_k(t,\tau)$ производится по узкой области Δk спектра, поэтому величина нормировочного объема не входит непосредственно в $R_k(t,\tau)$ и усреднение производится по всем направлениям k одинаково. Вместе с тем область Δk спектра выбирается достаточно широкой, чтобы вмещать много собственных колебаний нормировочного объема (т. е. чтобы выполнялось неравенство $k^2 \Delta k V \gg 1$), но весьма малой по сравнению с самим k. Для элементов турбулентности, сравнимых по порядку величины с V, эти требования несовместимы, но к элементам такого масштаба статистические методы и без того неприменимы. Следовательно, предлагаемый нами метод реализуем лишь в том случае, если самые крупные элементы турбулентности практически не дают вклада в интересующие нас средние.

Чтобы извлечь из уравнений гидродинамики какие-либо утверждения относительно величин $R_k(t,\tau)$, рассмотрим следующее выражение

$$\dot v_k = \left(t+\frac{\tau}{2}\right) v_{-k}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)=$$
$$= -i\sum_{k'}\left(v_{k'}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)k\right)\left(v_{k-k'}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)v_{-k}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)\right)+i(uk)v_k\left(t+\frac{\tau}{2}\right)v_{-k}\left(t-\frac{\tau}{2}\right). \tag{80}$$

Член $v_{k'}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)$ в этом выражении можно заменить интегралом по времени от $\dot v_{k'}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)$:

$$v_{k'}\left(t+\frac{\tau}{2}\right) = \int\limits_{-T}^{t+\tau/2} \dot v_{k'}(t')\,dt' + v_{k'}(-T) = \int\limits_{0}^{t+\tau/2+T} d\tau'\dot v_{k'}\left(t+\frac{\tau}{2}-\tau'\right)+v_{k'}(-T). \tag{81}$$

Если T выбрать достаточно большим, то корреляция между $v_{-k}(t)$ и $v_{k'}(T)$ исчезает. Поэтому после подстановки (81) в (80) целесообразно выполнить предельный переход $T\to\infty$. Усреднив затем по направлениям (при усреднении выпадает член с u), мы получим из (80) и (81)

$$\sum_k^{k+\Delta k} \dot v_k\left(t+\frac{\tau}{2}\right)v_{-k}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)=$$
$$= -\sum_k^{k+\Delta k}\sum_{k'}\sum_{k''}\int\limits_0^\infty d\tau'\left(v_{k''}\left(t+\frac{\tau}{2}-\tau'\right)k'\right)\left[v_{k'-k''}\left(t+\frac{\tau}{2}-\tau'\right)k - \right.$$
$$\left. - \frac{(kk')\left(v_{k'-k''}\left(t+\frac{\tau}{2}-\tau'\right)k'\right)}{k'^2}\right]\left(v_{k-k'}\left(t+\frac{\tau}{2}\right)v_{-k}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)\right). \tag{82}$$

Учитывая, как это было сделано в разделе 4, только члены типа (63), подставляя k' вместо $k-k'$ и интегрируя по косинусу угла между k и k', приходим к следующему выражению:

$$\sum_k^{k+\Delta k} \dot v_k\left(t+\frac{\tau}{2}\right)v_{-k}\left(t-\frac{\tau}{2}\right)=$$
$$\sum_k^{k+\Delta k}\int dk'k'^2\frac{V}{(2\pi)^3}\frac{\pi}{16}\int\limits_0^\infty d\tau'|\bar v_k^2||\bar v_{k'}^2|R_k\left(t-\frac{\tau'}{2},\tau-\tau'\right)R_k\left(t+\frac{\tau-\tau'}{2},\tau'\right)\times$$
$$\times k^{-3}k'^{-3}(k^2-k'^2)\left[2kk'\left(k^4+k'^4-\frac{2}{3}k^2k'^2\right)-(k^2+k'^2)(k-k^2)\ln\frac{k+k'}{|k-k'|}\right]. \tag{83}$$

Это соотношение позволяет выразить производные по времени $\frac{dR_k(t,\tau)}{dt}$ и $\frac{dR_k(t,\tau)}{d\tau}$ через R_k. Кроме того, если величины R_k известны, то из (83) можно вычислить диссипацию энергии, положив $\tau=0$. При этом предполагается, что турбулентность в целом либо стационарна, либо затухает очень медленно, и времена, за которые интенсивность $|v_k^2|$ заметно изменяется, очень велики по сравнению с периодами

флуктуаций v_k. Величина $|\bar{v}_k^2|$ означает тогда среднее по интервалу времени, очень большому по сравнению с периодами флуктуаций, но все же малому по сравнению со временем затухания.

Выражение для $\frac{dR_k(t,\tau)}{dt}$ задает меру флуктуаций величин $R_k(t,\tau)$ относительно их временного среднего

$$R_k\tau = \overline{R_k(t,\tau)} \tag{84}$$

как функцию времени. Можно предположить, что эти флуктуации малы в области малых τ, определены мелкомасштабными элементами турбулентности и возрастают с ростом τ. Позднее мы рассмотрим все эти вопросы подробнее.

Прежде чем приступать к вычислениям, необходимо заранее условиться, каким образом выбирать частичный объем V и его скорость u. Можно было бы попытаться положить $u = 0$ и отождествить V с полным объемом, но при этом мы получили бы ложное представление о наиболее важных соотношениях. Убывание со временем τ корреляционной функции $\overline{R_k(t,\tau)} = R_k(\tau)$ в этой системе координат определялось бы самыми крупномасштабными элементами турбулентности и поэтому происходило бы очень быстро. Можно показать, что в этой системе координат корреляционная функция в достаточно хорошем приближении задается выражением

$$R_k(\tau) = 1 - \frac{kv_0\tau}{\sqrt{3}} \exp\left\{-\frac{k^2v_0^2\tau^2}{12}\right\} \int\limits_0^{(kv_0\tau)/\sqrt{12}} dx \cdot e^{x^2}.$$

Мы не будем подробно останавливаться на вычислениях, к которым оно приводит, так как само выражение не понадобится нам в дальнейшем. Физический смысл поясняют следующие соображения. Задаваемая им функция $R_k(\tau)$ убывает за некоторое время на величину порядка $\frac{2\pi}{v_0}$. За это время вследствие большой скорости самых крупномасштабных элементов турбулентности через точку наблюдения проходит ровно один вихрь с длиной волны $\frac{2\pi}{k}$. Таким образом, убывание корреляционной функции за это время означает просто, что скорость самых крупных элементов турбулентности по порядку величины равна v_0, но статистически совершает флуктуации вокруг этого значения. Процесс, о котором идет речь, не имеет никакого отношения к образованию вихрей с длиной волны $\frac{2\pi}{k}$. Более того, из развитых Вайцзеккером соображений подобия следует ожидать, что при законе $F(k) \approx k^{-5/3}$ образование вихрей происходит лишь по прошествии времен порядка $2\pi v_0^{-1}k^{-2/3}k_0^{-1/3}$. С другой стороны, диссипация энергии связана именно с образованием вихрей, а не с движением в целом. Если желательно учесть в уравнениях образование вихрей, то необходимо воспользоваться системой координат, движущейся вместе с жидкостью. Частичный объем V необходимо выбрать так, чтобы его линейные размеры были порядка $\frac{2\pi}{k}$, но не намного больше $\frac{2\pi}{k}$, и двигать его со скоростью среднего движения в нем. В качестве подобного предположения будем считать, что каждому волновому числу k можно поставить в соответствие объем V, для которого величина Vk^3 не зависит от k, и для выбранных таким образом движущихся элементов объема корреляционная функция $R(t,\tau)$, как следовало бы ожидать из соображений подобия Вайцзеккера, представляет собой универсальную функцию переменной $v_0k^{2/3}k_0^{1/3}t$ (или, соответственно, $v_0k^{2/3}k_0^{1/3}\tau$).

Покажем, что наше предположение позволяет удовлетворить соотношениям для $R_k(t,\tau)$, вытекающим из (83), если F_k распределены по закону $k^{-5/3}$.

Действительно, если положить $R(t,\tau)=g(\zeta,\eta)$, где

$$\zeta=\frac{v_0}{6}k^{2/3}k_0^{1/3}t,\qquad \eta=\frac{v_0}{6}k^{2/3}k_0^{1/3}\tau,\qquad \frac{k}{k'}=y, \tag{85}$$

то из (83) получим:

$$\begin{aligned}\frac{dg(\zeta,\eta)}{d\eta}&=\frac{3}{16}\int\limits_0^\infty dy\,f(y)\int\limits_0^\infty d\eta'\left[g\left(\zeta-\frac{\eta'}{2},\eta'-\eta\right)g'\left(\left(\zeta+\frac{\eta-\eta'}{2}\right)y^{2/3},\eta' y^{2/3}\right)-\right.\\&\left.-g\left(\zeta-\frac{\eta'}{2},\eta'+\eta\right)g\left(\left(\zeta-\frac{\eta+\eta'}{2}\right)y^{2/3},\eta' y^{2/3}\right)\right],\\ \frac{dg(\zeta,\eta)}{d\zeta}&=\frac{3}{8}\int\limits_0^\infty dy\,f(y)\int\limits_0^\infty d\eta'\left[g\left(\zeta-\frac{\eta'}{2},\eta'-\eta\right)g\left(\left(\zeta+\frac{\eta-\eta'}{2}\right)y^{2/3},\eta' y^{2/3}\right)-\right.\\&\left.-g\left(\zeta-\frac{\eta'}{2},\eta'+\eta\right)g\left(\left(\zeta-\frac{\eta+\eta'}{2}\right)y^{2/3},\eta' y^{2/3}\right)\right],\end{aligned} \tag{86}$$

где

$$f(y)=\frac{1-y^2}{y^{14/3}}\left[2y\left(1-\frac{2}{3}y^2+y^4\right)-\left(1-y^2\right)\left(1-y^4\right)\ln\frac{1+y}{|1-y|}\right]. \tag{87}$$

Постоянные k_0, v_0 в уравнения (86) и (87) не входят. Это позволяет надеяться на то, что интеграл по y сходится как при малых, так и при больших y ($f(y)$ достаточно быстро стремится к нулю как при $y\to 0$, так и при $y\to\infty$), поэтому нижний предел интеграла по k' без сколько-нибудь значительной погрешности можно выбрать равным не k_0, а просто 0. Кроме того, сходимость интеграла при больших значениях k показывает, что в рассматриваемой проблеме молекулярное трение не играет роли. Поведение спектра в области самых малых элементов турбулентности при средних значениях k несущественно для корреляционных функций $R(t,\tau)$ и диссипации энергии.

Прежде чем мы приступим к анализу численного решения уравнения (86), воспользуемся еще раз соотношением (83), чтобы вычислить в требуемом приближении диссипацию энергии. Положим для этого $\tau=0$ и проинтегрируем соотношение (83) по k в произвольных пределах от K_1 до K_2:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int\limits_{K_1}^{K_2}4\pi k^2\,dk\left|\frac{v_k^2}{2}\right|&=\frac{\pi^2 V}{4(2\pi)^3}\int\limits_{K_1}^{K_2}\frac{dk}{k}\int\limits_0^\infty\frac{dk'}{k'}|\bar v^2||\bar v_{k'}^2|\int\limits_0^\infty d\tau'\,\overline{R_k\left(t-\frac{\tau'}{2},\tau'\right)R_{k'}\left(t-\frac{\tau'}{2},\tau'\right)}\times\\&\times\left(k^2-k'^2\right)\left[2kk'\left(k^4+k'^4-\frac{2}{3}k^2k'^2\right)-\left(k^2+k'^2\right)\left(k^2-k'^2\right)\ln\frac{|k-k'|}{k+k'}\right].\end{aligned} \tag{88}$$

Подынтегральное выражение правой части — антисимметричная функция по k и k'. Следовательно, при вычислении изменения со временем полной энергии

($K_1 = 0$, $K_2 = \infty$) мы получим нуль, поскольку интеграл в правой части вообще сходится, т. е. полная энергия постоянна во времени. Постоянство полной энергии следует требовать, так как молекулярным трением мы пренебрегаем. Если необходимо найти, как изменяется со временем энергия, заключенная в интервале спектра от K_1 до K_2, то интеграл в правой части можно преобразовать к следующему виду (антисимметричное подынтегральное выражение для простоты обозначим просто J):

$$\frac{d}{dt} = \int_{K_1}^{K_2} 4\pi k^2\,dk \left|\frac{v_k^2}{2}\right| = \int_{K_1}^{K_2} dk \int_0^{\infty} dk' J = \int_{K_1}^{K_2} dk \int_0^{K_1} dk' J - \int_{K_1}^{K_2} dk \int_{K_2}^{\infty} dk'(-J). \qquad (89)$$

В первом из интегралов в правой части последнего равенства J, а во втором $(-J)$ всегда положительны. Из (89) следует, что первый интеграл можно интерпретировать как энергию, поступающую в единицу времени из области с меньшими волновыми числами ($k' < K_1$) в область спектра с волновыми числами от K_1 до K_2, а второй интеграл — как энергию, уходящую в область с большими волновыми числами ($k' > K_2$). В частности, если положить $K_1 = 0$ и $K_2 \gg k_0$, то второй интеграл будет представлять полную диссипацию энергии. При нормальном спектре ($(F(k) \sim k^{-5/3}$) она должна зависеть от K_2. Итак, из (83), (86) и (89) мы получаем следующее выражение для диссипации энергии:

$$S = \frac{\rho}{24} v_0^3 k_0 \int_{K_2}^{\infty} \frac{dk''}{k''} \int_0^{K_2/k''} dy\, f(y) \int_0^{\eta} d\eta\, \overline{g\left(\zeta - \frac{\eta}{2}, \eta\right) g\left(\left(\zeta - \frac{\eta}{2}\right) y^{2/3}, \eta y^{2/3}\right)} =$$

$$= \frac{\rho}{24} v_0^3 h_0 \int_0^1 dy\,(-\ln y) f(y) \int_0^{\infty} d\eta\, \overline{g\left(\zeta - \frac{\eta}{2}, \eta\right) g\left(\left(\zeta - \frac{\eta}{2}\right) y^{2/3}, \eta y^{2/3}\right)}. \qquad (90)$$

Это выражение, как и должно быть, не зависит от K_2. Поскольку полная диссипация энергии определяется также выражением $\rho\varkappa\frac{\sqrt{3}}{8} v_0^3 k_0$ (см. соотношение (44)), то

$$\varkappa = \frac{1}{3\sqrt{3}} \int_0^1 dy\,(-\ln y) f(y) \int_0^{\infty} d\eta\, \overline{g\left(\zeta - \frac{\eta}{2}, \eta\right) g\left(\left(\zeta - \frac{\eta}{2}\right) y^{2/3}, \eta y^{2/3}\right)}. \qquad (91)$$

Если функция $g(\zeta, \eta)$ известна, то (91) позволяет численно получить значение постоянной $\varkappa$.

Переходим теперь к рассмотрению системы уравнений (86). Эта система значительно проще исходного уравнения (77), так как не содержит размерных величин и выведена непосредственно из равновесного спектра $k^{-5/3}$. С другой стороны, уравнения (86) содержат сведения о флуктуациях величины $g(\zeta, \eta)$ как функции от ζ и поэтому еще слишком сложны, чтобы их можно было решить точно. Поэтому в первом приближении можно было бы попытаться полностью пренебречь флуктуациями и вычислить лишь средние знания, но, к сожалению,

вклад флуктуаций в некоторых областях слишком велик, чтобы им можно было пренебречь. В этом можно убедиться, если рассмотреть второе из уравнений (86).

Действительно, если положить

$$g(\zeta,\eta) = g(\zeta) + \Delta g(\zeta,\eta), \tag{92}$$

где $g(\zeta)$ — среднее от $g(\zeta,\eta)$ по ζ:

$$g(\eta) = \overline{g(\zeta,\eta)}, \tag{93}$$

то, усреднив по времени второе из уравнений (86), получим:

$$\frac{3}{8}\int_0^\infty dy\, f(y)\int_0^\infty \eta'[g(\eta'-\eta)+g(\eta'+\eta)]g(\eta' y^{2/3}) =$$

$$= -\frac{3}{8}\int_0^\infty dy\, f(y)\int_0^\infty d\eta'\Big[\overline{\Delta g\Big(\zeta-\frac{\eta'}{2},\eta'-\eta\Big)\Delta g\Big(\Big(\zeta+\frac{\eta-\eta'}{2}\Big)y^{2/3},\eta' y^{2/3}\Big)} +$$

$$+ \overline{\Delta g\Big(\zeta-\frac{\eta'}{2},\eta'+\eta\Big)\Delta g\Big(\Big(\zeta-\frac{\eta+\eta'}{2}\Big)y^{2/3},\eta' y^{2/3}\Big)}\Big]. \tag{94}$$

Это соотношение показывает, что флуктуации $\Delta g(\zeta,\eta)$ не всегда малы. Хотя левая часть соотношения (94) обращается в нуль при $\eta = 0$ (это следует из соотношения

$$f\left(\frac{1}{y}\right) = -y^{4/3} f(y), \tag{95}$$

которое нам предстоит вывести в дальнейшем, и означает, что спектр $k^{-5/3}$ действительно находится в равновесии), при возрастании $|\eta|$ левая часть принимает большие значения, поэтому сомнительно, чтобы приближение, получаемое при переходе от (82) к (83) с учетом только средних типа (63), оказалось достаточным. Однако мне не удалось улучшить приближение или получить что-нибудь, кроме самой грубой оценки решения уравнений (86).

К такой оценке приводит предположение о том, что при больших значениях η первое слагаемое в правой части (94) гораздо больше второго слагаемого, поскольку в первом слагаемом интеграл берется по области $\eta' \sim \eta$, дающей, очевидно, большой вклад, в то время как во втором слагаемом при больших η множители Δg во всей области интегрирования принимают малые значения. Следовательно, по крайней мере при больших η представляется разумным принять предположение о том, что вторым слагаемым в правой части соотношения (94) можно пренебречь. В этом приближении, усредняя по времени первое из уравнений (86) и используя (94), получаем:

$$\frac{dg(\eta)}{d\eta} = -\frac{3}{8}\int_0^\infty f(y)\,dy\int_0^\infty d\eta' g(\eta+\eta')g\Big(\eta' y^{2/3}\Big) \quad (\text{при} \quad \eta \gg 0). \tag{96}$$

Это уравнение можно использовать, например, следующим образом. Предположив, что $g(\eta)$ имеет какой-нибудь правдоподобный вид, оставить сначала масштаб

по оси η неопределенным, а затем подобрать его так, чтобы уравнение (96) выполнялось при больших η как можно более точно. Тем самым крутизна спада при больших η будет передана довольно точно, а именно эта крутизна является решающим критерием при выборе значения $\varkappa$.

При вычислениях удобно ввести вместо y и $f(y)$ новые переменные

$$s = y^{2/3}, \quad \varphi(s)\,ds = f(y)\,dy. \tag{97}$$

Тогда, как видно из (87) (см. также (95)),

$$\varphi\left(\frac{1}{s}\right) = -s\varphi(s). \tag{98}$$

Это соотношение основано на том, что диссипация энергии в интервале волновых чисел от $\frac{1}{\alpha}k$ до k с точностью до множителя, связанного с преобразованием подобия, совпадает с диссипацией энергии в интервале волновых чисел от k до αk.

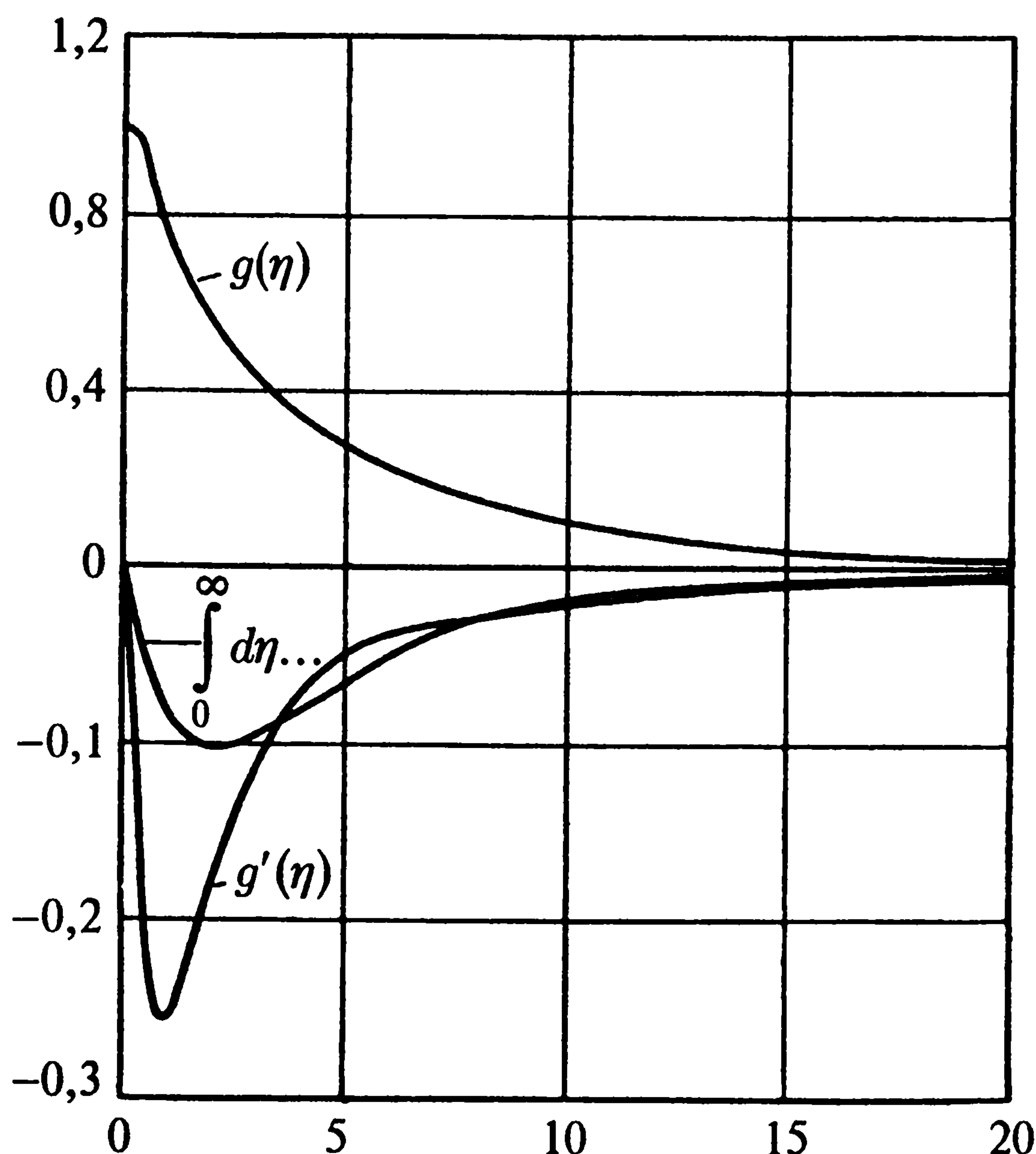


Рис. 4

Кроме того, хорошее приближение дает следующее представление $\varphi(s)$:

$$\varphi(s) = \frac{32}{5}s\left(1 - s^3\right)\left(1 - \frac{2}{7}s^2\right) \quad \text{при} \quad 0 \leqslant s \leqslant 1. \tag{99}$$

Соотношение (98) позволяет свести $\varphi(s)$ при бóльших s к интервалу $0 \leqslant s \leqslant 1$.

На рис. 4 приведены правдоподобный вид функции $g(\eta)$, правой части уравнения (96), записанной в виде $\int_0^\infty d\eta\ldots$, и $g'(\eta)$. Масштаб выбран таким, что две последние кривые совпадают при больших η. При малых η между кривыми существует заметное различие, но при малых η перестает выполняться уравнение (96). Подставляя полученную функцию $g(\eta)$ в (91) и пренебрегая флуктуациями, получаем:

$$\varkappa = \frac{1}{2\sqrt{3}}\int_0^1 ds\,(-\ln s)\varphi(s)\int_0^1 d\eta\, g(\eta)g(\eta s) = 0{,}98. \tag{100}$$

Эта грубая оценка дает правильный порядок величины $\varkappa$, но точное значение постоянной может отличаться от 0,98 даже вдвое. Таким образом, расчеты, которыми мы занимались в заключительном разделе статьи, хотя и не приводят к точному значению постоянной $\varkappa$, все же позволяют дать качественное математическое описание процессов, лежащих в основе диссипации энергии. Возможно, что

всестороннее обсуждение различных экспериментов Симмонса[23], Драйдена[24], Прандтля[25] и других авторов по измерению спектра и затухания турбулентности позволит с достаточной точностью определить значение $\varkappa$.

---

[23] *Simmons L. F. G., Salter C.* Op. cit.

[24] *Dryden H. L., Schubauer G. B., Mock W. C., Skramstad H. K.* Op. cit.; *Dryden H. L.* Op. cit.

[25] *Prandtl L.* Proc. V Intern. Congr. Appl. Mech. Cambrdige (Mass.), 1938. P. 340.

К ТЕОРИИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ И ИЗОТРОПНОЙ ТУРБУЛЕНТНОСТИ*

В последнее время статистическая теория турбулентности, основы которой были заложены Тейлором[1)], Карманом и Говартом[2)], достигла столь значительных успехов, что позволила дать удовлетворительное объяснение распределению энергии в спектре между турбулентными вихрями. Колмогоров[3)] и независимо от него Онзагер[4)] и Вайцзеккер[5)] ввели гипотезу подобия, позволяющую определять спектр для вихрей при больших числах Рейнольдса, а Гейзенберг[6)] распространил эти расчеты на те компоненты спектра, которые соответствуют малым числам Рейнольдса. Поскольку распределение энергии среди крупных вихрей должно быть геометрической, а не статистической проблемой, то можно сказать, что в настоящее время достигнуто хорошее понимание статистической части спектра. Недавно Бэтчелор и Таунсенд[7)] исследовали затухание турбулентного движения, вызванного ячеистой решеткой в аэродинамической трубе. Ниже мы применим к этой задаче статистическую теорию.

В наших расчетах будут использоваться обозначения Гейзенберга[8)]. Если $\rho F(k)$ — энергия, приходящаяся на интервал волновых чисел от k до $k + dk$, то для диссипации энергии было предложено следующее уравнение (уравнение (13) из этой работы):

$$S_k = \left\{ \mu + \rho k \int\limits_k^\infty \sqrt{\frac{F(k'')}{k''^3}}\, dk'' \right\} \int\limits_0^k 2F(k')k'^2 2\, dk', \tag{1}$$

где S_k — полная потеря энергии той части спектра, которая заключена между $k = 0$ и k. Физическое допущение, положенное в основу уравнения (1), состоит в том, что для всех вихрей с волновыми числами от 0 до k действие меньших вихрей можно учесть введением дополнительной вязкости, поскольку характер переноса импульса меньшими вихрями схож с действием обычного трения (Прандтль[9)]).

---

* On the theory of statistical and isotropic turbulence. — Proc. Roy. Soc., 1948, Ser. A, 195, 1042, 402–406. *Перевод Ю. А. Данилова.*

1) *Taylor G. I.* Proc. Roy. Soc., 1935, **A 151**, 421.

2) *Karman Th. von, Howarth L.* Proc. Roy. Soc., 1938, **A 164**, 192.

3) *Колмогоров А. Н.* ДАН СССР, 1941, **30**, 299–303; **32**, 19–21.

4) *Onsager L.* Phys. Rev., 1945, **68**, 286.

5) *Waizsäker C. F. von.* Zs. Phys., 1948, **124**, 614.

6) *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1948, **124**, 628.

7) *Batchelor G. K., Townsend A. A.* Proc. Roy. Soc., 1947, **A 190**, 534; 1948, **A 193**, 539; 1948, **A 194**, 527.

8) *Heisenberg W.* Op. cit.

9) *Prandtl L.* Nachr. Ges. Wiss. Göttingen, 1945, 6.

Дополнительная вязкость должна зависеть от интенсивности $F(k)$ малых вихрей, т. е. от части спектра с большими k. Если принять эту гипотезу, то выражение

$$\eta_k = \rho k \int_0^\infty \sqrt{\frac{F(k'')}{k''^3}}\, dk'' \qquad (2)$$

для турбулентной вязкости следует как простейшее допущение из соображений размерности, так как величина η_k должна быть произведением плотности, скорости и длины. Коэффициент k — численная постоянная, имеющая, судя по экспериментальным данным, значение около 0,8. Соотношение (2) — не что иное, как простая математическая запись гипотезы подобия, введенной Колмогоровым, Онзагером и Вайцзеккером.

В цитированной работе Гейзенберга вид $F(k)$ рассматривался для стационарного турбулентного движения. Было показано, что при меньших k (т. е. при больших числах Рейнольдса для вихрей) $F(k) \sim k^{5/3}$, а при бóльших k (при малых числах Рейнольдса для вихрей) $F(k) \sim k^{-7}$. Оба результата следуют из гипотезы подобия. Действительно, если обозначить через v_k характерную скорость вихря диаметра $\frac{\pi}{k}$, то при средних значениях k ($k \gg k_0$, где k_0 характеризует самые крупные вихри, но $\frac{v_k}{k\nu} \gg 1$) произведение турбулентной вязкости ($\sim \rho\frac{v_k}{k}$) и среднего значения $\overline{\mathrm{rot}^2 v}$ для этой части спектра ($\sim v_k^2 k^2$) должно быть постоянным, так как величина S_k означает полный поток энергии и поэтому не должна зависеть от k. Отсюда следует, что

$$\frac{v_k}{k} v_k^2 k^2 = \mathrm{const}, \quad v_k \sim k^{-1/3}, \qquad (3)$$

а это в свою очередь эквивалентно $F(k) \sim k^{5/3}$. С другой стороны, при очень больших k $\left(\frac{v_k}{k\nu} \ll 1\right)$ полный поток энергии от всех больших вихрей в малые вихри пропорционален величине $\rho\frac{v_k}{k}\overline{\mathrm{rot}^2 v}$, где среднее $\overline{\mathrm{rot}^2 v}$ может быть теперь взято практически по всему спектру и в рассматриваемом приближении не зависит от k. Эта энергия должна быть равна энергии, поглощаемой малыми вихрями за счет обычной вязкости, т. е. $\sim \mu v_k^2 k^2$. Следовательно,

$$\rho\frac{v_k}{k}\overline{\mathrm{rot}^2 v} \sim \mu v_k^2 k^2, \quad v_k \sim k^{-3}, \qquad (4)$$

что эквивалентно $F(k) \sim k^{-7}$.

Если турбулентное движение не поддерживается внешними силами, то оно должно затухать и скорость затухания можно вывести непосредственно из уравнения (1), преобразовав его предварительно к виду $\left(\nu = \frac{\mu}{\rho}\right)$

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_0^k F(k,t)\, dk = -\left\{\nu + k\int_k^\infty \sqrt{\frac{F(k'',t)}{k''^3}}\, dk''\right\}\int_0^k 2F(k',t)k'^2\, dk'. \qquad (5)$$

Если начальное спектральное распределение $F(k,0)$ задано, то (5) определяет спектр в любой последующий момент времени. И в этом случае можно попытаться найти решения, обладающие простыми свойствами подобия. Непосредственно видно, что семейство частных решений можно получить, положив

$$F(k,t) = \frac{1}{\sqrt{t}} f\left(k\sqrt{t}\right). \qquad (6)$$

Уравнение (5) переходит при этом в уравнение

$$\int_0^x f(x)\,dx - \frac{1}{2}xf(x) = \left\{\nu + k\int_x^\infty \sqrt{\frac{f(x'')}{x''^3}}\,dx''\right\}\cdot\int_0^x 2f(x')x'^2\,dx'. \qquad (7)$$

Физический смысл гипотезы подобия (6) проще всего сформулировать в виде утверждения о том, что полный спектр определяется по существу одной величиной размерности длины, в качестве которой можно выбрать $\frac{\pi}{k}$ — диаметр наибольших вихрей, и их скоростью v_0. Если принять эту гипотезу, то из соображений размерности следует, что

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{k_0}\right) \sim v_0 \quad \text{и} \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{v_0}\right) \sim k_0, \quad \text{откуда сразу же получаем:} \quad k_0 \sim v_0 \sim \frac{1}{\sqrt{t}}. \qquad (8)$$

Заметим, что подобие (6) не нарушается и при наличии вязкости и что число Рейнольдса турбулентного движения остается постоянным на протяжении всего затухания, так как оно по существу равно $\frac{\rho v_0}{\mu k_0} \sim \text{const}$.

Рассмотрим решение (7) сначала для случая $\nu = 0$, т. е. при очень больших числах Рейнольдса. Функция $f(x)$, насколько можно судить, оказывается однозначно определенной с точностью до преобразования подобия, так как если $f = g(x)$ — решение уравнения (7), то $f = \alpha^3 g(\alpha x)$ — также решение уравнения (7).

Из уравнения (7) можно вывести важные свойства функции $f(x)$:

$$f(x) \sim \begin{cases} \text{const}\cdot x & \text{при любом малом } x, \\ \text{const}\cdot x^{5/3} & \text{при любом большом } x. \end{cases} \qquad (9)$$

Разумеется, второе свойство следует непосредственно из гипотезы Колмогорова. Положив $k = 0{,}8$, получим приближенное решение уравнения (8):

$$f(x) = \frac{x\alpha^4}{\left[1 + \left(\frac{x\alpha}{1\cdot 1}\right)^{4/3}\right]^2}. \qquad (10)$$

Это решение точно при малых и больших значениях α и дает достаточно хорошее приближение при средних значениях; α — произвольная постоянная интегрирования.

Задав начальное состояние при $t = t_0$ двумя постоянными v_0 и k_0, мы получим наконец из (6) и (10)

$$F(k,t) = \frac{v_0^2}{k_0^2}\,\frac{k}{\left[1 + \left(\frac{k}{1\cdot 1}\right)^{4/3}\left(\frac{tv_0}{k_0}\right)^{2/3}\right]^2}. \qquad (11)$$

Причина, по которой функция $F(k,t)$ пропорциональна k при малых значениях k, состоит в том, что диссипация энергии в очень больших вихрях очень мала, и если должно существовать подобие в смысле соотношения (6), то оно может проявляться лишь при линейной зависимости $F(k,t)$ от k.

При конечных, но очень малых ν спектр (11) может быть верен при не слишком больших k, а затем, как показано в работе Гейзенберга[10], изменяется по закону k^{-7}.

[10] *Heisenberg W.* Op. cit.

В противоположном случае при очень больших значениях ν, т. е. при очень малых числах Рейнольдса, для всего турбулентного движения в целом также может быть получено приближенное решение уравнения (7). При малых значениях x это решение ведет себя как $xe^{-2\nu x^2}$, а при больших — как x^{-7}. С разумной точностью его можно (при $\beta \ll 1$) задать в виде

$$F(k,t) = \beta^2\nu^2 k\left[e^{-k^2\nu t} + \frac{k\beta}{4}\,\frac{k^2\nu t}{\left(1+2^{1/3}k^2\nu t\right)^3}\right], \qquad (12)$$

где параметр $\beta \ll 1$ по существу задает число Рейнольдса для рассматриваемого движения.

А теперь нам необходимо обратиться к вопросу о том, должно ли реальное турбулентное движение при затухании стремиться к простому решению (11). Это решение описывает состояние равновесия. Вихри меньших размеров порождаются вихрями больших размеров и отдают свою энергию вихрям еще меньших размеров. Источниками энергии всегда служат самые крупные вихри. Гипотезы подобия (6) и (8) можно сформулировать как утверждение о том, что часть самых крупных вихрей становится еще больше, а часть уменьшается. Убывая в размерах, вихри очень быстро достигают общего колмогоровского равновесия. Увеличиваясь, вихри сохраняют примерно тот же момент количества движения, которым они обладали в начале, так как даже если к крупному вихрю присоединяются новые части жидкости, то они не дают вклада в средний момент количества движения. Поэтому для самых больших вихрей величина $\frac{v_0}{k_0}$ остается приблизительно постоянной, что приводит снова к соотношениям (8).

Возникает вопрос, будет ли реальное турбулентное движение стремиться к этому равновесию. Эксперименты Бэтчелора и Таунсенда[11)] показывают, что довольно скоро затухание действительно начинает следовать закону (8), причем энергия убывает как $\frac{1}{t}$, а после некоторого периода затухание ускоряется, число Рейнольдса турбулентности уменьшается, пока не становится столь малым, что, как показали подробные исследования Бэтчелора и Таунсенда[12)], инерциальные члены перестают играть существенную роль в турбулентном движении, и энергия начинает убывать как $t^{-5/2}$.

При больших значениях k, т. е. при малых вихрях, реальное турбулентное движение очень быстро приходит в состояние равновесия. Все трудности связаны с областью больших вихрей. В работе Гейзенберга[13)] предполагалось, что размеры самых крупных вихрей приближенно постоянны. Как показывает соотношение (5), это допущение заведомо не верно и не следует ни из какого разумного спектра. Реальный спектр не может также стремится при малых значениях k и к (11), так как при очень малых k он должен убывать до нуля гораздо быстрее, чем (11). Бэтчелор[14)] показал, что $F(k)$ изменяется при очень малых k как

$$F(k) \sim k^4 \cdot \text{const}. \qquad (13)$$

Обычно реальный спектр в некотором диапазоне не слишком малых k хорошо представим функцией вида (11). Но заведомо существует область очень малых k, в которой $F(k)$ с самого начала меньше, чем функция (11); самые большие вихри никогда

[11)] *Batchelor G. K., Townsend A. A.* Proc. Roy. Soc., 1948, A **193**, 539.

[12)] *Batchelor G. K., Townsend A. A.* Proc. Roy. Soc., 1948, A **194**, 527.

[13)] *Heisenberg W.* Op. cit.

[14)] *Batchelor G. K.* Proc. Roy. Soc., 1949, A **195**, 513.

не могут содержать столько энергии, сколько требует функция (11). Следовательно, линейное затухание энергии ($v^2 \sim \frac{1}{t}$) будет происходить до тех пор, пока, наконец, максимум кривой (11) не сдвинется к меньшим значениям k, близким к той области, в которой $F(k)$ меньше функции (11). На этой стадии самые большие вихри уже не обладают запасом энергии, достаточным для поддержания закона $\frac{1}{t}$, число Рейнольдса турбулентного движения падает и достигает столь малых значений, что инерциальные члены, как показали Бэтчелор и Таунсенд[15], утрачивают всякое значение.

Точка, в которой на смену закону $\frac{1}{t}$ приходит более быстрое затухание, зависит от начальных условий, в частности, от количества энергии, содержащейся в компонентах Фурье с длинами волн, превышающими ширину ячейки в решетке.

Приведенное нами описание затухания турбулентности остается в силе, даже если начальное число Рейнольдса турбулентного движения не велико, так как гипотеза подобия (6) приводит к решениям (5) при любом значении числа Рейнольдса. Важным условием для реализации закона $\frac{1}{t}$ при затухании является существование весьма большого диапазона в начальном спектре (или возникновение такого диапазона в самом начале установления турбулентного равновесия), в пределах которого $F(k) \sim k$ и закон $\frac{1}{t}$ ограничен только тем, что при очень малых значениях k закон $F(k) \sim k$ перестает действовать.

Несколько замечаний можно добавить относительно физической картины турбулентности, какой она представляется в свете последних работ. Некогда считалось, что турбулентность обусловлена вязкостью. В справедливости подобного мнения не возникало никаких сомнений, поскольку в отсутствие вязкости жидкость теоретически могла бы совершать все классические ламинарные движения, при которых она скользит вдоль стенок; только вязкость вызывает завихрение жидкости вблизи стенок. В настоящее время мы знаем, что истина — почти в обратном. Невязкая жидкость представляет собой систему с бесконечным числом степеней свободы. Мало вероятно, что возбуждаться должны лишь те немногие степени свободы, которые соответствуют ламинарному течению. Если подвести энергию к невязкой жидкости, то энергия распределится по всем степеням свободы. Установится некое равновесное распределение, аналогичное распределению Максвелла в газах и описываемое спектром, найденным Колмогоровым, Онзагером и Вайцзеккером. Именно вязкость понижает число степеней свободы, так как приводит к очень быстрому затуханию всех движений очень малых вихрей. Таким образом, только вязкость делает возможным ламинарное движение. Турбулентность представляет собой по существу статистическую проблему того же типа, как и проблемы статистической механики, поскольку речь идет о распределении энергии по очень большому числу степеней свободы. Так же, как и в теории Максвелла, эта проблема может быть решена без обращения к деталям механического движения. Именно поэтому нам и удалось решить ее здесь, исходя из простых соображений подобия. Уравнение (1) — более чем простой способ описания этих свойств подобия.

[15] *Batchelor G. K., Townsend A. A.* Proc. Roy. Soc., 1948, A **194**, 527.

Часть V

ТЕОРИЯ ЯДРА

О СТРОЕНИИ АТОМНЫХ ЯДЕР. I*

Обсуждаются следствия гипотезы о том, что атомные ядра построены из протонов и нейтронов без участия электронов.

§ 1. Гамильтонова функция ядра.
§ 2. Отношение заряда к массе и особая стабильность ядра He.
§ 3–5. Стабильность ядер и ряды радиоактивного распада.
§ 6. Обсуждение физических основных предположений.

Опыты Кюри и Жолио[1] вместе с их объяснениями, данными Чадвиком[2] показали, что в строении ядер важная роль принадлежит новой фундаментальной частице — нейтрону. Из этого результата естественно напрашивается гипотеза, что атомные ядра построены из протонов и нейтронов без участия электронов[3]. Если эта гипотеза правильна, то она чрезвычайно упрощает теорию атомных ядер. Действительно, фундаментальные трудности, с которыми мы сталкивались в теории β-распада и в статистике ядра азота, тогда сведутся к вопросу, какой статистике подчиняется нейтрон и каким образом он может распадаться на протон и электрон, в то время как строение ядер может быть описано по законам квантовой механики с учетом взаимодействия между протонами и нейтронами.

§ 1

В следующих рассуждениях мы будем предполагать, что нейтроны следуют правилам статистики Ферми и обладают спином $\frac{1}{2}\frac{h}{2\pi}$. Это предположение необходимо для объяснения статистики ядра азота, и оно соответствует эмпирическим данным по ядерным моментам. Если бы мы приняли допущение, что нейтрон состоит из протона и электрона, то нам пришлось бы тогда приписывать электрону статистику Бозе и нулевой спин. Однако детальное рассмотрение этого допущения оказывается нецелесообразным. Наоборот, нейтрон надо рассматривать как самостоятельную фундаментальную частицу; правда, следует предполагать, что при известных условиях нейтрон может расщепляться на протон и электрон, причем законы сохранения энергии и импульса по всей вероятности уже не выполняются[4].

Рассмотрим сначала одну из сил взаимодействия элементарных составных частей ядра, а именно силу между нейтроном и протоном. Если мы сблизили нейтрон и протон на сравнимое с размерами ядра расстояние, то — по аналогии с ионом H_2^+ — отрицательные заряды будут обмениваться своими координатами друг с другом, и частота обмена будет определяться функцией $\frac{1}{\hbar}J(r)$, в которой r —

---

* Über den Bau der Atomkerne. I. — Zs. Phys., 1932, **77**, 1–11. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Curie I., Joliot F.* C. R. Acad. Sci., 1932, **194**, 273, 876.

[2] *Chadwick J.* Nature, 1932, **129**, 312.

[3] См. также *Iwanenko D.* Nature, 1932, **129**, 798.

[4] См. также *Bohr N.* Faraday Lecture. J. Chem. Soc., 1932, 349.

расстояние между двумя частицами. Величина $J(r)$ соответствует обменному или правильнее координатному обменному интегралу теории молекул. Этот обмен координатами тоже можно наглядно представить себе с помощью электронов без спина, подчиняющихся статистике Бозе. Однако правильнее рассматривать существование обменного интеграла $J(r)$ как фундаментальное свойство пары нейтрон-протон, не пытаясь связывать его с движением электронов.

Аналогично, взаимодействие двух нейтронов мы будем описывать энергией взаимодействия $-K(r)$, причем по аналогии с молекулой H_2 можно предполагать, что эта энергия приводит к силам притяжения между нейтронами[5]. Наконец, будем обозначать дефект массы нейтрона по отношению к протону через D (в единицах энергии). Предположим еще, что кроме сил, описываемых функциями $J(r)$ и $K(r)$, и кулоновского отталкивания $\frac{e^2}{r}$ между каждыми двумя протонами не действуют никакие другие заметные силы взаимодействия. Далее, мы будем пренебрегать всеми релятивистскими эффектами, а, следовательно, и взаимодействием между спином и орбитой. О функциях $J(r)$ и $K(r)$ можно сделать только некоторые совершенно общие утверждения. Предполагается, что в областях порядка 10^{-12} см с увеличением r они быстро спадают до нуля. Далее, по аналогии с молекулами следует предполагать, что для нормальных значений r функция $J(r)$ больше, чем $K(r)$; это предположение будет существенным для последующего рассмотрения. Дефект массы нейтрона D можно считать малым по сравнению с обычными дефектами массы элементов.

Для того чтобы теперь написать гамильтонову функцию атомного ядра, целесообразно ввести следующие переменные. Каждой частице сопоставляется пять величин — три пространственные координаты $(x, y, z) = \mathfrak{r}$, спин σ^z в направлении z и пятая величина ρ^ζ, которая может принимать два значения $+1$ и -1. Если для частицы $\rho^\zeta = +1$, то это означает нейтрон, если $\rho^\zeta = -1$, то мы имеем протон. Поскольку в гамильтоновой функции вследствие обмена координатами встречаются также элементы, отвечающие переходу от $\rho^\zeta = +1$ к $\rho^\zeta = -1$, то целесообразно ввести еще матрицы

$$\rho^\xi = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho^\eta = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho^\zeta = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

Однако пространство ξ, η, ζ не имеет, конечно, ничего общего с истинным пространством.

В этих переменных полная гамильтонова функция ядер имеет вид (M — масса протона, $r_{kl} = |\mathfrak{r}_k - \mathfrak{r}_l|$, $\mathfrak{p}_k$ — импульс частицы k):

$$H = \frac{1}{2M}\sum_k \mathfrak{p}_k^2 - \frac{1}{2}\sum_{k>l} J(r_{kl})(\rho_k^\xi\rho_l^\xi + \rho_k^\eta\rho_l^\eta) - \frac{1}{4}\sum_{k>l} K(r_{kl})(1+\rho_k^\zeta)(1+\rho_l^\zeta) + \\ + \frac{1}{4}\sum_{k>l}\frac{e^2}{r_{kl}}(1-\rho_k^\zeta)(1-\rho_l^\zeta) - \frac{1}{2}D\sum_k(1+\rho_k^\zeta). \quad (1)$$

Из этих пяти членов первый означает кинетическую энергию частиц, второй — энергию обменного взаимодействия, третий — силы притяжения нейтронов, четвертый — кулоновское отталкивание между протонами, пятый — дефект массы нейтронов.

Теперь возникает чисто математическая задача — получить из уравнения (1) выводы о строении ядер.

[5] За указание на это и за некоторые другие ценные замечания я хотел бы сердечно поблагодарить В. Паули.

§2

Мы рассмотрим теперь ядро, состоящее из n частиц, а именно из n_1 нейтронов и n_2 протонов. Величина $n_1 = \frac{1}{2}\sum_k(1+\rho_k^\zeta)$ коммутирует с H в уравнении (1) и, следовательно, представляет собой интеграл движения; это же справедливо для n_2. Если мы сначала пренебрежем последними тремя членами в уравнении (1) и сохраним только первые два, то энергия при перемене знака $\sum \rho_k^\zeta$ на обратный по соображениям симметрии останется неизменной. Следовательно, значению $\sum_k \rho_k^\zeta = 0$, наверное, соответствует экстремальное значение энергии. Поскольку в сумму $\sum_k \rho_k^\zeta = n$ энергия связи в этом приближении не входит вообще, то сумме $\sum_k \rho_k^\zeta = 0$ в общем случае принадлежит *минимальное* из всех значений энергии. Эту ситуацию можно охарактеризовать также следующим образом: первые два члена гамильтоновой функции полностью симметричны по протонам и нейтронам. Поэтому минимум энергии, обусловленный обменными интегралами, получается тогда, когда ядро состоит из одинакового числа нейтронов и протонов. Этот результат хорошо подтверждается экспериментальным фактом, что масса атомных ядер в общем примерно вдвое больше их заряда (в единицах массы и заряда протона). Последние три члена уравнения (1) сдвигают соответствующее минимуму энергии отношение числа нейтронов к числу протонов в сторону первых, и притом по мере возрастания общего числа n все в большей мере из-за кулоновских сил. Детальное применение этого результата к вопросу о том, какие ядра могут встречаться в природе и какие нет, предполагает подробное обсуждение стабильности ядер, что будет проделано только в разделах 3–5.

Единственным ядром, для которого можно еще непосредственно указать решение уравнения (1), является ядро изотопа водорода Юри[6] с массой 2. Оно состоит из одного протона и одного нейтрона, и волновую функцию $\psi(\mathfrak{r}_1\rho_1^\zeta, \mathfrak{r}_2\rho_2^\zeta)$, разрешающую уравнение (1), по аналогии с квантовомеханической проблемой гелия всегда можно представить в виде

$$\psi(\mathfrak{r}_1\rho_1^\zeta, \mathfrak{r}_2\rho_2^\zeta) = \varphi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2) \cdot \left[\alpha(\rho_1^\zeta)\beta(\rho_2^\zeta) \pm \alpha(\rho_2^\zeta)\beta(\rho_1^\zeta)\right]. \tag{2}$$

Здесь введены сокращенные обозначения

$$\begin{aligned} \alpha(\rho) &= \delta_{\rho,1}, \\ \beta(\rho) &= \delta_{\rho,-1}. \end{aligned} \tag{3}$$

Притяжение двух частиц получается, если в скобках в правой части формулы (2) выбрать положительный знак. Тогда функция $\varphi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2)$ удовлетворяет волновому уравнению

$$\left\{\frac{1}{2M}(\mathfrak{p}_1^2 + \mathfrak{p}_2^2) - J(r_{12}) - D - W\right\}\varphi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2) = 0. \tag{4}$$

В энергетическом наинизшем состоянии функция $\varphi(\mathfrak{r}_1, \mathfrak{r}_2)$ симметрична по $\mathfrak{r}_1$ и $\mathfrak{r}_2$, что возможно при наличии спина, несмотря на статистику Ферми.

Проводить более точное математическое исследование ядра He с помощью уравнения (1) мы пока не будем. Мы приведем здесь только следующие качественные соображения. Рассматривая сначала ядра, состоящие только из нейтронов, мы

[6] *Urey H., Brickwedde F., Murphy G.* Phys. Rev., 1932, **39**, 164; **40**, 1, 464.

можем увидеть, что в соответствии с уравнением (1) ядро из двух нейтронов должно быть особенно устойчивым образованием, так как собственная функция системы может быть симметричной по двум нейтронам (т. е. по их координатам $\mathfrak{r}$ и ρ), но вследствие принципа Паули не более чем по двум нейтронам. То обстоятельство, что такие состоящие только из нейтронов ядра неустойчивы по другим, не содержащимся в уравнении (1) причинам, которые будут рассмотрены лишь позднее, для последующего не играет никакой роли. По той же причине можно предполагать, что ядро He, состоящее из двух протонов и двух нейтронов, вследствие принципа Паули аналогично «замкнутой оболочке» и поэтому оно должно быть особенно устойчивым, что и подтверждается опытом. Сказанному соответствует также то, что полный спин этого ядра равен нулю.

Рассмотрим теперь силы, действующие между двумя ядрами на большом расстоянии. Предположим, что для каждого из этих двух ядер $\sum \rho^\zeta = 0$, т. е. число нейтронов равно числу протонов. Для взаимодействия ядер, которое можно рассматривать как малое возмущение, энергия в соответствии с уравнением (1) имеет вид

$$H^{(1)} = -\frac{1}{2}\sum_{kk'} J(r_{kk'})\left(\rho_k^\xi \rho_{k'}^\xi + \rho_k^\eta \rho_{k'}^\eta\right) - \\ -\frac{1}{4}\sum_{kk'} K(r_{kk'})\left(1+\rho_k^\zeta\right)\left(1+\rho_{k'}^\zeta\right) + \frac{1}{4}\sum_{kk'}\frac{e^2}{r_{kk'}}\left(1-\rho_k^\zeta\right)\left(1-\rho_{k'}^\zeta\right). \tag{5}$$

При этом индекс k относится к частицам одного, а индекс k' — к частицам другого ядра. Если мы образуем среднее по времени значение (5) по невозмущенному движению ядер, то останется среднее кулоновское отталкивание ядер и среднее притяжение нейтронов, причем первое преобладает на больших, второе — на малых расстояниях. Среднее по времени значение наибольшего первого члена в формуле (5) обращается в нуль, так как среднее значение ρ^ξ равно нулю, если известно, что $\sum \rho^\zeta = 0$ (это следует проще всего из симметрии задачи относительно оси ζ в пространстве ξ, η, ζ). Если же мы проделаем вычисления во втором приближении теории возмущений, то недиагональные матричные элементы первого члена в формуле (5) приведут к притяжению сил Ван дер Ваальса; ведь энергия возмущения во втором порядке всегда имеет вид

$$W_k^{(2)} = -\sum_l \frac{|H_{kl}^{(1)}|^2}{h\nu_{kl}}. \tag{6}$$

Таким образом, два ядра на больших расстояниях отталкиваются из-за своих зарядов, а на малых расстояниях они связываются благодаря вандерваальсову притяжению и притяжению нейтронов друг к другу.

§ 3

В соответствии с приведенными выше соображениями ядро можно представить себе как такое образование, которое в общем имеет несколько больше нейтронов, чем протонов, и содержит особенно устойчивые конфигурации из двух протонов и двух нейтронов — α-частицы. Рассмотрим теперь вопрос, при каких условиях такое ядро будет стабильным и каким образом оно может распадаться в случае нестабильности.

Возьмем сначала ядро, состоящее из одних только нейтронов; вследствие притяжения нейтронов, описываемого третьим членом в уравнении (1), такое ядро

на первый взгляд было бы стабильным, так как пришлось совершить работу, чтобы удалить из него какой-нибудь нейтрон. Вероятно все же, что можно было бы выделить энергию, удалив из ядра один нейтрон и поместив на его место один протон, так как выигрыш от прибавления протона с избытком компенсирует потерю от удаления нейтрона; это справедливо при нашем предположении, что обменные силы превышают силы притяжения между нейтронами. Поэтому можно предположить, что такое ядро стало бы распадаться, испуская β-лучи. Таким образом, хотя применимость законов сохранения импульса и энергии к распаду нейтрона и ставится под вопрос экспериментальным фактом непрерывности спектра β-излучения, мы здесь можем воспользоваться балансом энергии β-излучения, пока мы утверждаем: β-распад происходит тогда и только тогда, когда масса покоя рассматриваемого ядра больше, чем суммарная масса покоя электрона и ядра, возникающего при β-распаде. Это предположение обычно также делалось и в теории атомного ядра[7]. Для его обоснования можно сослаться на то, что по аналогии с квантовомеханическими системами нейтрон, вероятно, время от времени претерпевал бы спонтанный распад под влиянием сильного электрического поля. Если баланс энергии в указанном выше смысле оказывается положительным, то это означает: в ядре на нейтрон действует силовое поле, которое — подобно тому, как это делает электрическое поле, — стремится разложить его. Если же баланс энергии (который всегда определяется точно), окажется отрицательным, то такая сила на нейтрон не действует.

Принимая только что рассмотренное предположение об устойчивости ядер по отношению к β-распаду, можно сделать следующий вывод: в ядре, первоначально состоявшем из одних только нейтронов, нейтроны будут превращаться в протоны с испусканием β-лучей до тех пор, пока энергия, приобретаемая при добавлении одного протона, не станет строго равной энергии, которую необходимо затратить для отрыва одного нейтрона, т. е. до тех пор, пока не будет достигнут минимум энергетической кривой при постоянном числе частиц. При еще меньших числах нейтронов ядро будет безусловно стабильным по отношению к β-распаду.

Положение минимума в зависимости от порядкового числа можно оценить из следующих соображений. Выигрыш в обменной энергии, получаемый при добавлении одного протона, — в предположении, что функция $J(r)$ с ростом расстояния стремится к нулю достаточно быстро, для тяжелых ядер может зависеть в основном только от отношения нейтронов к числу протонов $\frac{n_1}{n_2}$; поэтому мы введем для него обозначение $f\left(\frac{n_1}{n_2}\right)$. Совершенно таким же образом проигрыш в энергии, связанный с отрывом одного нейтрона, для тяжелых ядер будет стремиться к некоторому значению $g\left(\frac{n_1}{n_2}\right)$, зависящему только от $\frac{n_1}{n_2}$. Наконец, при добавлении протона необходимо еще для преодоления электростатических сил затратить энергию

$$\frac{n_2 e^2}{R} \sim \mathrm{const} \cdot \frac{n_2}{\sqrt[3]{n}}.$$

(Здесь R означает радиус ядра, который предполагается приблизительно равным $\sqrt[3]{n}$.) Таким образом, положение минимума определяется уравнением

$$f\left(\frac{n_1}{n_2}\right) = g\left(\frac{n_1}{n_2}\right) + \mathrm{const} \cdot \frac{n_2}{\sqrt[3]{n}}. \qquad (7)$$

[7] *Gamow G.* Der Bau des Atomkerns und die Radioaktivität. Leipzig, 1932.

Предполагая, что функции $f\left(\frac{n_1}{n_2}\right)$ и $g\left(\frac{n_1}{n_2}\right)$ приближенно можно считать линейными по $\frac{n_1}{n_2}$, мы получаем для такого приближения

$$\frac{n_1}{n_2} = C_1 + C_2\frac{n_2}{\sqrt[3]{n}}, \qquad (8)$$

причем C_1 и C_2 — постоянные.

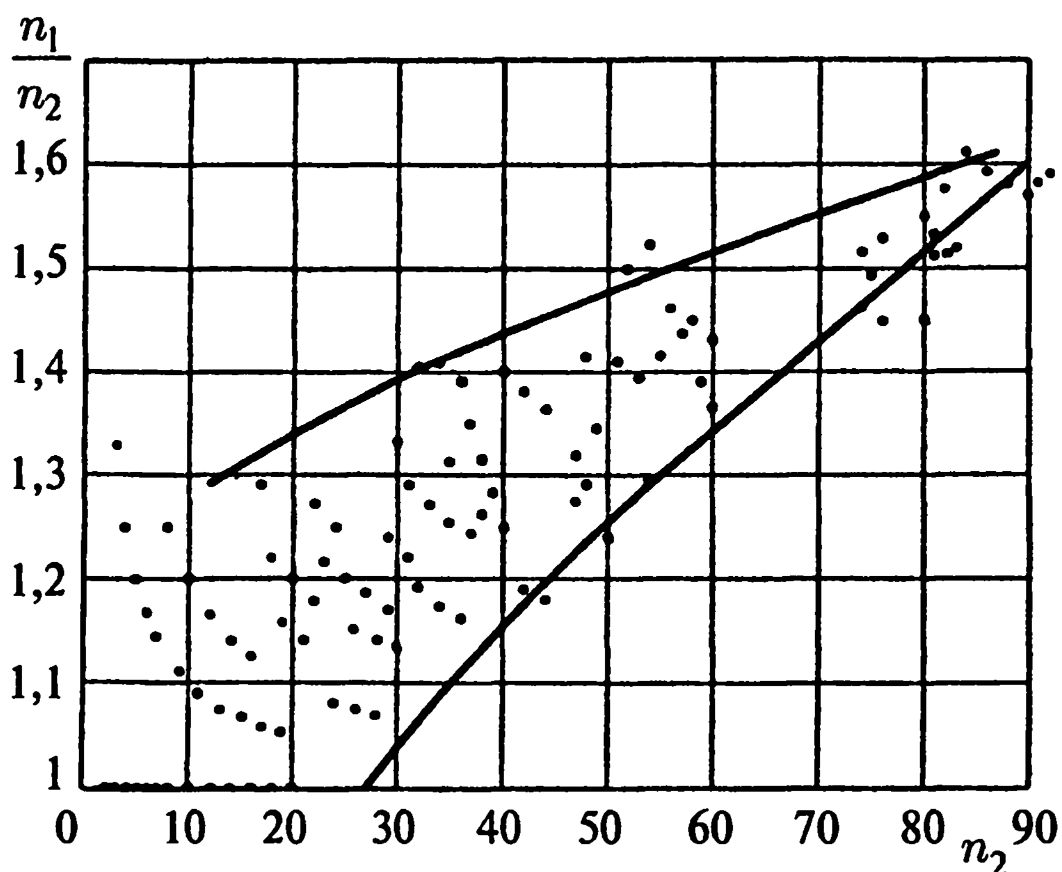


Рис. 1

На рис. 1 для каждого зарядового числа показана максимальная и минимальная величина отношения $\frac{n_1}{n_2}$, наблюдаемая для соответствующего элемента. Эти величины колеблются очень сильно, что отчасти объясняется, вероятно, возможным существованием у многих элементов стабильных изотопов, пока еще не замеченных из-за их малой распространенности. Для сравнения с уравнением (8) через наивысшие точки проведена кривая типа (8) с постоянными $C_1 = 1{,}06$, $C_2 = 0{,}0313$[8]. Качественно ход отношения $\frac{n_1}{n_2}$ в системе ядер, таким образом, хорошо воспроизводится кривой типа (8).

§4

Когда отношение $\frac{n_1}{n_2}$ окажется по величине ниже некоторого критического значения, кулоновское отталкивание положительных зарядов может, особенно в тяжелых ядрах, стать по сравнению с обменными и межнейтронными силами настолько большим, что ядро начнет спонтанно распадаться, испуская α-частицы. Тот факт, что этот распад происходит с испусканием α-частиц, а не протонов, следует из значительно меньшей в общем случае энергии связи α-частиц в ядре. Ядра, которые образовались в результате цепочки β-распадов, не могли бы распадаться с испусканием протонов даже в принципе, ибо β-распад всегда кончается на том месте, на котором для удаления одного протона потребовалось еще затратить энергию.

Минимальное значение $\frac{n_1}{n_2}$ определяется условием, что кулоновская энергия, освобождаемая при испускании α-частицы, компенсируется энергией других взаимодействий α-частиц с остаточным ядром. Последняя энергия для тяжелых ядер снова будет зависеть только от отношения $\frac{n_1}{n_2}$. Предполагая опять, что эта зависимость приближенно выражается линейной функцией, мы приходим к уравнению, аналогичному (8)

$$\frac{n_1}{n_2} = c_1 + c_2\frac{n_2}{\sqrt[3]{n}}. \qquad (9)$$

На рис. 1 проведена кривая (9) с постоянными $c_1 = 0{,}47$, $c_2 = 0{,}077$, которая приблизительно воспроизводит положение наинизших точек. При обсуждении двух кривых на рис. 1 следует учитывать, что четыре постоянных — C_1, C_2, c_1, c_2 — определены эмпирически, что уравнения (8) и (9) дают только приближенное

[8] Приведенные в оригинале значения $C_1 = 1{,}173$, $C_1 = 0{,}0125$ исправлены в соответствии с более поздними данными.

решение и, наконец, что — и это самое главное — в строго развитой теории стабильность ядра должна определяться не только отношением $\frac{n_1}{n_2}$, но и более тонкими деталями строения ядра. Поэтому в качестве границ устойчивости ядер по отношению к β- и α-распаду обе кривые имеют лишь качественное значение. В области, где эти две кривые сближаются, расположены радиоактивные элементы, и далее мы рассмотрим свойства этих элементов более подробно.

§ 5

Уже поверхностный взгляд на рис. 1 показывает нам, что для суждения о стабильности ядер в случае радиоактивных элементов одного только значения отношения $\frac{n_1}{n_2}$ недостаточно. Критические величины отношения лежат на различных для трех радиоактивных семейств местах, и даже внутри каждого ряда радиоактивного распада устойчивость по отношению к β-распаду зависит еще от некоторых особых свойств ядра, которые мы сейчас обсудим. Допустим, например, что в начале радиоактивного ряда имеется ядро с четным числом протонов и что оно еще устойчиво по отношению к β-распаду. Испуская α-частицы, это ядро превращается в ядра с меньшими числами протонов и нейтронов, вследствие чего отношение $\frac{n_1}{n_2}$ будет возрастать, пока не превысит критическую величину. Тогда начинается β-распад, т. е. становится энергетически выгодным удаление нейтрона и прибавление протона; после этого распада число протонов будет нечетным. Ввиду большой стабильности ядра He тогда уж, наверное, будет энергетически выгодным превратить в протон и второй нейтрон и тем самым построить внутри ядра ядро He. Следовательно, в случае первоначально четного порядкового числа ядро может испустить друг за другом всегда *две* β-частицы, а при первоначально нечетном числе протонов испускается только *одна* β-частица. Это правило подтверждается всюду в радиоактивных рядах. Таким образом, критическое отношение $\frac{n_1}{n_2}$ для испускания первой β-частицы выше, чем для испускания второй. После испускания двух β-частиц отношение $\frac{n_1}{n_2}$ понизится в общем настолько, что дальнейший β-распад уже не наступит. Однако потом может происходить распад с α-излучением, который опять постепенно повышает отношение $\frac{n_1}{n_2}$, пока оно не превысит критическую величину второй раз (и притом для четного числа протонов); затем снова наступает β-распад и т. д. Наконец, где-нибудь ядро станет стабильным. Бывает также, что ядро может распадаться, испуская как β-лучи, так и α-частицы; тогда появляются известные разветвления, которые дальше мы здесь рассматривать не будем. В таблице 1 для трех радиоактивных рядов приведены значения порядкового числа n_2, числа нейтронов n_1 и отношения $\frac{n_1}{n_2}$. Значения отношения, при которых наступает β-распад, напечатаны жирным шрифтом. Из таблицы видно, что вторая β-неустойчивость в радиоактивных рядах (у B-продуктов) действительно наступает точно на том месте, где отношение $\frac{n_1}{n_2}$ превышает критическую величину, определяемую первой β-неустойчивостью. Только третья, β-неустойчивость в ряду радия (у радия D) не может быть объяснена столь простыми представлениями.

Итак, критическое отношение для β-распада при четном или нечетном числе протонов приблизительно составляет: в ряду тория 1,585 или 1,55, в ряду радия 1,595 или 1,57, в ряду актиния 1,57[9] или 1,55[10]. Правда, β-распад Ra D учит нас, что кроме числа $\frac{n_1}{n_2}$ и особой устойчивости ядра He на устойчивость могут оказывать влияние и другие структурные свойства ядер.

---

[9] Исправлено в соответствии с примечанием 2 к статье Über den Bau der Atomkerne, II.

[10] *Gamow G.* Op. cit.

Таблица 1

Ряд тория				Ряд радия				Ряд актиния			
Элемент	n_2	n_1	$\frac{n_1}{n_2}$	Элемент	n_2	n_1	$\frac{n_1}{n_2}$	Элемент	n_2	n_1	$\frac{n_1}{n_2}$
Th	90	142	1,579	U_I	92	146	1,588	Pa	91	140	1,539
α				α				α			
MTh_1	88	140	1,591	UX_1	90	144	1,600	Ac	89	138	1,551
β				β				β			
MTh_2	89	139	1,562	UX_2	91	143	1,571	RaAc	90	137	1,522
β				β				α			
RaTh	90	138	1,533	U_{II}	92	142	1,544	AcX	88	135	1,535
α				α				α			
ThX	88	136	1,545	Jo	90	140	1,556	AcEm	86	133	1,547
α				α				α			
ThEm	86	134	1,558	Ra	88	138	1,569	AcA	84	131	1,560
α				α				α			
ThA	84	132	1,571	RaEm	86	136	1,582	AcB	82	129	1,574
α				α				β			
ThB	82	130	1,587	RaA	84	134	1,595	AcC	83	128	1,542
β				α				β			
ThC	83	129	1,555	RaB	82	132	1,610	AcC′	84	127	1,512
β				β				α			
ThC′	84	128	1,524	RaC	83	131	1,579	AcD	82	125	1,524
α				β							
ThD	82	126	1,537	RaC′	84	130	1,548				
				α							
				RaD	82	128	1,561				
				β							
				RaE	83	127	1,530				
				β							
				RaF	84	126	1,500				
				α							
				RaG	82	124	1,512				

§ 6

В заключение мы обсудим еще вкратце вопрос о принципиальных границах точности, внутри которых гамильтонова функция ядра типа (1) может правильно описывать физические свойства ядер. Рассматривая ядра как аналоги молекул и сравнивая нейтроны с атомами, мы приходим к выводу, что уравнение (1) может быть справедливым только в том случае, если движение протонов будет медленным по отношению к движению электрона в нейтроне; т. е. скорость протона должна быть малой по отношению к скорости света. По этой причине мы опустили в гамильтоновой функции (1) все релятивистские члены. Ошибка, вносимая этим пренебрежением, по порядку величины составляет $(\frac{v}{c})^2$, т. е. около 1%. В этом приближении нейтрон можно рассматривать в некоторой степени как статическое образование, что мы и делали выше. Однако следует ясно представлять себе, что существуют другие физические явления, в которых нейтрон уже нельзя рассматривать статически, и уравнение (1) для них будет неприменимо. К этим явлениям принадлежит, например, эффект Мейтмер—Хупфельда — рассеяние γ-лучей на ядрах. К ним же относятся все эксперименты, в которых нейтроны могут быть расщеплены на протоны и электроны; примером этого служит торможение высокоэнергичных электронов при прохождении через атомные ядра. Для обсуждения таких опытов требуется более глубокое рассмотрение фундаментальных трудностей, проявляющихся в непрерывности β-спектров.

(*Поступила 7 июня 1932 г.*)

О СТРОЕНИИ АТОМНЫХ ЯДЕР. II*

§ 1. Устойчивость ядер с четным (нечетным) числом нейтронов.
§ 2. Рассеяние γ-лучей на атомном ядре.
§ 3. Свойства нейтрона.

Цель излагаемых ниже исследований состоит в том, чтобы установить, в какой мере можно свести фундаментальные трудности теории атомного ядра к вопросу о существовании и свойствах нейтрона. В первой части настоящей работы с этой точки зрения обсуждается, в частности, устойчивость ядер по отношению к распаду с испусканием α- и β-лучей. Применение закономерностей, которые оказались там определяющими для структуры рядов радиоактивного распада, также к более легким нерадиоактивным атомным ядрам позволяет и здесь объяснить некоторые известные эмпирические правила систематики атомных ядер, впервые указанные Беком[1)].

§ 1
Устойчивость ядер

В соответствии с исследованиями части I[2)] ядро может распадаться с испусканием β-лучей тогда, когда при добавлении к ядру одного протона освобождается больше энергии, чем надо затратить для удаления одного нейтрона из возникшего

---

* Über den Bau der Atomkerns. II. — Zs. Phys., 1932, **78**, 156–164. *Перевод А. А. Сазыкина.*

1) *Beck G.* Zs. Phys., 1928, **47**, 407; **50**, 548.

2) К сожалению, в части I атомные веса в ряду актинидов, взятые из книги Гамова (*Gamow G.* Der Bau des Atomkerns und die Radioaktivität. Leipzig, 1932.), оказались на 4 единицы больше истинных. Соответствующая правильная таблица дана по Резерфорду, Чадвику и Эллису (*Rutherford*, *Chadwick*, *Ellis*. Radiations from Radioactive Substances. Cambridge, 1930):

Элемент	n_2	n_1	$\frac{n_1}{n_2}$
Pa	91	140	1,539
α			
Ac	89	138	<u>1,551</u>
α			
RaAc	90	137	1,522
α			
AcX	88	135	1,535
α			
AcEm	86	133	1,547
α			
AcA	84	131	1,560
α			
AcB	82	129	<u>1,574</u>
β			
AcC	83	128	<u>1,542</u>
β			
AcC	84	127	1,512
α			
AcD	82	125	1,524

таким образом ядра. Представление об устойчивости ядер относительно β-распада нетрудно получить, рассматривая график, на котором изображена в зависимости, например, от n_1 энергия самого низшего уровня при заданной общей массе ядра ($n = n_1 + n_2$, где n_1 — число нейтронов, n_2 — число протонов). Если при переходе от n_1 к $n_1 - 1$ энергию можно понизить, то соответствующее ядро β-неустойчиво. Когда отношение n_1/n_2 становится слишком малым, ядро начинает распадаться, испуская α-лучи.

В первом приближении кривая, изображающая энергию E как функцию n_1 при заданной массе n, имеет следующий вид (рис. 1). При $n_1 = 0$ энергия обращается в нуль, так как протоны взаимно отталкиваются, и связь между ними не образуется. Затем при возрастании n_1 энергия падает до минимума, расположенного несколько правее $n_1/n_2 = 1$, и поднимается снова, пока при $n_1 = n$ она не достигает некоторого все еще отрицательного значения, которое соответствует энергии связи ядра, состоящего из одних только нейтронов. Если минимум кривой достигается при $n_1/n_2 = a$, то в этом приближении все ядра, для которых $n_1/n_2 > a$, были бы β-неустойчивы, и наоборот, все другие ядра были бы устойчивы к β-распаду. (На рисунке неустойчивые ядра обозначены крестиком, устойчивые — кружком). Однако в соответствии с результатами § 5 части I эта картина нуждается в уточнении.

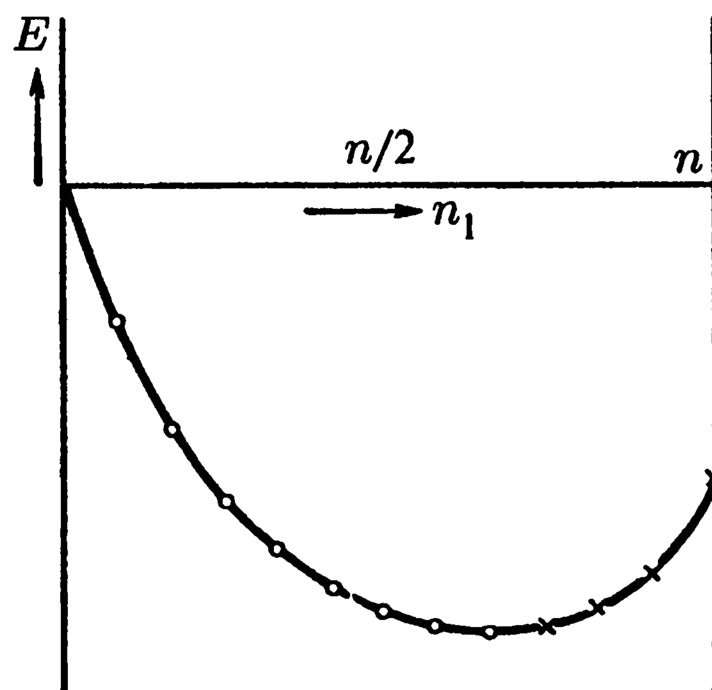


Рис. 1

Рассмотрим сначала атомные ядра с четным числом n. Вследствие особой устойчивости ядра гелия значения энергии, соответствующие четным числам n_1 и n_2, будут располагаться там значительно ниже, чем значения энергии состояний с нечетными n_1 и n_2 для примерно одинаковых значений n_1/n_2. Следовательно, для изображения энергии как функции n_1 мы должны нарисовать не одну, а две кривые типа рис. 1, а именно, первую — для четных значений n_1 и n_2, вторую — для нечетных n_1 и n_2. Вторая кривая будет расположена выше первой на приблизительно постоянный, т. е. в первом приближении не зависящий от n_1 и n_2, отрезок (рис. 2). Рассматривая этот рисунок, мы видим, что на нижней кривой точки справа от минимума уже могут принадлежать устойчивым ядрам, тогда как на верхней кривой точки слева от минимума еще имеют по соседству ниже расположенную точку, т. е. соответствуют ядрам, которые могут распадаться с испусканием β-лучей. На верхней кривой при большей общей массе n ядра становятся β-устойчивыми возможно только при таких малых значениях n_1/n_2, что раньше уже наступает α-неустойчивость; в этом случае устойчивые атомные ядра с нечетными числами n_1 и n_2 не существуют вообще.

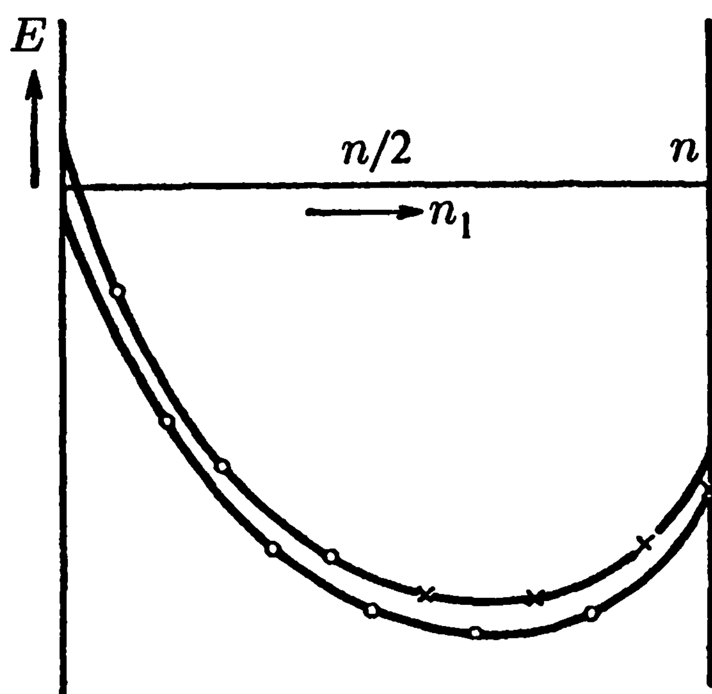


Рис. 2

Энергия вблизи минимума может быть представлена формулами

$$E_{\text{чет}} = A\left[n\left(\frac{n_1}{n} - b\right)^2 + C\right], \qquad E_{\text{нечет}} = A\left[n\left(\frac{n_1}{n} - b\right)^2 + C + c\right]. \tag{1}$$

Постоянная b в зависимости от значения n равна или несколько больше $1/2$, c приближенно не зависит от n_1 и n. Граница между β-неустойчивыми и β-устойчивыми

ядрами для четных чисел n_1 определяется формулами

$$E_{\text{чет}}(n_1) = E_{\text{нечет}}(n_1 - 1), \tag{2}$$

т. е.

$$n\left(\frac{n_1}{n} - b\right)^2 = n\left(\frac{n_1 - 1}{n} - b\right)^2 + c$$

и

$$\frac{n_1}{n} = b + \frac{1}{2}\left(c + \frac{1}{n}\right) \approx b + \frac{c}{2}. \tag{3}$$

Для нечетных чисел n_1 эта граница получается из уравнения

$$E_{\text{нечет}}(n_1) = E_{\text{чет}}(n_1 - 1), \tag{4}$$

т. е.

$$n\left(\frac{n_1}{n} - b\right)^2 + c = n\left(\frac{n_1 - 1}{n} - b\right)^2$$

и

$$\frac{n_1}{n} = b + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{n} - c\right) \approx b - \frac{c}{2}. \tag{5}$$

Когда число n превысит некоторое определенное значение, граница α-неустойчивости выдвинется за $b - c/2$, и устойчивых ядер с нечетными n_1 и n_2 тогда уже не будет. При дальнейшем возрастании n граница α-неустойчивости перешагнет, наконец, и через $b + c/2$, и тогда уже не будет никаких устойчивых ядер. На опыте из устойчивых ядер с нечетными числами n_1 и n_2 известны только ядра ^2H, ^6Li, ^{10}B, ^{14}N. В рядах радиоактивного распада имеется еще несколько элементов с нечетными n_1 и n_2, распадающихся с испусканием β-лучей в соответствии с только что рассмотренной закономерностью[3].

В ядрах с нечетным общим числом n значительной разницы в энергии ядер с четным или нечетным n_1 не существует; ибо поскольку принцип запрета Паули должен соблюдаться как для протонов, так и для нейтронов, присоединение к замкнутым оболочкам протонов или нейтронов будет примерно одинаково выгодным энергетически. Правда, вследствие особой устойчивости ядра Не можно предполагать, что четное число протонов будет энергетически несколько выгоднее нечетного числа нейтронов, как это, по-видимому, и вытекает из схемы распада ряда актиния; однако различия здесь не так выражены, как для элементов с четным n. С этим согласуется то обстоятельство, что для нечетных n стабильные элементы с четным и нечетным порядковым числом встречаются вплоть до появления радиоактивных веществ. При этом максимальные значения n_1/n_2 при четном порядковом числе должны лежать в общем несколько выше, чем при нечетном.

Правда, закономерность этого ряда, насколько пока что известно, не может быть выявлена из опытных данных. Тот факт, что принцип Паули играет существенную роль в ядре как для нейтронов, так и для протонов, наиболее непосредственным образом может быть получен из следующей закономерности. При заданном порядковом числе в общем наблюдается четное максимальное и минимальное значение n_1.

[3] Расположенные в «местах разветвления» элементы ThC и RaC хотя и распадаются также с испусканием α-лучей, но особенно сильная β-неустойчивость тяжелых элементов с нечетными числами n_1 и n_2 выражается здесь в том, что они распадаются преимущественно с испусканием β-лучей — α-распад происходит здесь редко по сравнению с β-распадом, тогда как AcC с четным числом нейтронов распадается преимущественно с испусканием α-частиц.

Точно так же оказываются четными наблюдаемые экстремальные значения n_2 при заданном четном числе нейтронов. Исключения из этого правила имеют место для легких элементов, так как там удаление или прибавление одной частицы влечет за собой уже большое изменение ядра. Далее, наблюдаются немногие исключения также для тяжелых ядер, которые, возможно, могут быть объяснены неполнотой нашего знания схем изотопов.

§2
Рассеяние γ-лучей на атомном ядре

В этом параграфе будет рассмотрено рассеяние γ-лучей[4)] на атомных ядрах с точки зрения обсуждаемой здесь модели ядра.

Такое рассеяние может быть вызвано двумя различными причинами. Во-первых, под влиянием внешнего излучения движение протонов и нейтронов может изменяться так, что ядро будет испускать вторичные сферические волны с частотой падающего излучения или с частотой, отличающейся от нее на собственную частоту ядра (рамановское рассеяние). Во-вторых, отдельный нейтрон, т. е. связанный с ним отрицательный заряд, под влиянием падающего излучения может испускать рэлеевское или рамановское рассеяние излучения. Если считать нейтрон состоящим из протона и электрона, то этот второй вид рассеянного излучения можно поставить в параллель с рассеянием видимого света на атомах, и поэтому мы будем предполагать, что оно вследствие малости электрона значительно интенсивнее, чем рассеянное излучение, упомянутое первым.

Вычисление, которое будет выполнено позже, покажет также, что первый вид рассеянного излучения может вносить наблюдаемый вклад в общее рассеяние ядра самое большее в местах резонанса. Для объяснения эффекта Мейтнер—Хупфельда в первом приближении оказывается достаточным чисто нейтронное рассеяние. Поскольку свойства нейтрона до сих пор большей частью неизвестны, теоретическое предсказание рассеяния γ-излучения на нейтронах сделать невозможно. Однако вычислить с точностью до неизвестного постоянного множителя интенсивность рассеянного всем ядром излучения в зависимости от чисел n_1 и n_2 все же можно, если, как это делается здесь, считать элементарными составными частями ядра только нейтроны и протоны. Если рассеянное излучение представляет собой в основном когерентное рэлеевское излучение, т. е. имеет такую же частоту, как и падающее излучение, то интенсивность рассеянного излучения должна быть пропорциональна n_1^2, пока длина волны излучения велика по сравнению с диаметром ядра; если рассеянное излучение в основном рамановское, то его интенсивность будет пропорциональной n_1. Обозначая эффективное поперечное сечение нейтрона, определяющее рассеянное излучение, через σ_N, мы получаем для эффективного сечения ядра σ_K в случае рэлеевского рассеяния

$$\sigma_K = \sigma_N \cdot n_1^2 \tag{6}$$

и в случае рамановского рассеяния

$$\sigma_K = \sigma_N \cdot n_1. \tag{7}$$

Опыты лучше описываются уравнением (6) и поэтому они говорят в пользу выдвинутого Мейтнер и Хупфельдом[5)] тезиса о том, что рассеянное излучение имеет

---

4) За выяснение обсуждаемых в этом параграфе вопросов я обязан в основном пасхальной конференции в Копенгагене и в особенности дискуссиям, которые я имел возможность вести там по этому предмету с проф. Н. Бором.

5) *Meitner L., Hupfeld H.* Zs. Phys., 1932, **75**, 705. См., однако, противоречащую этому предположению работу *Gray L., Tarrant G.* Proc. Roy. Soc. London, 1932, **A 136**, 662.

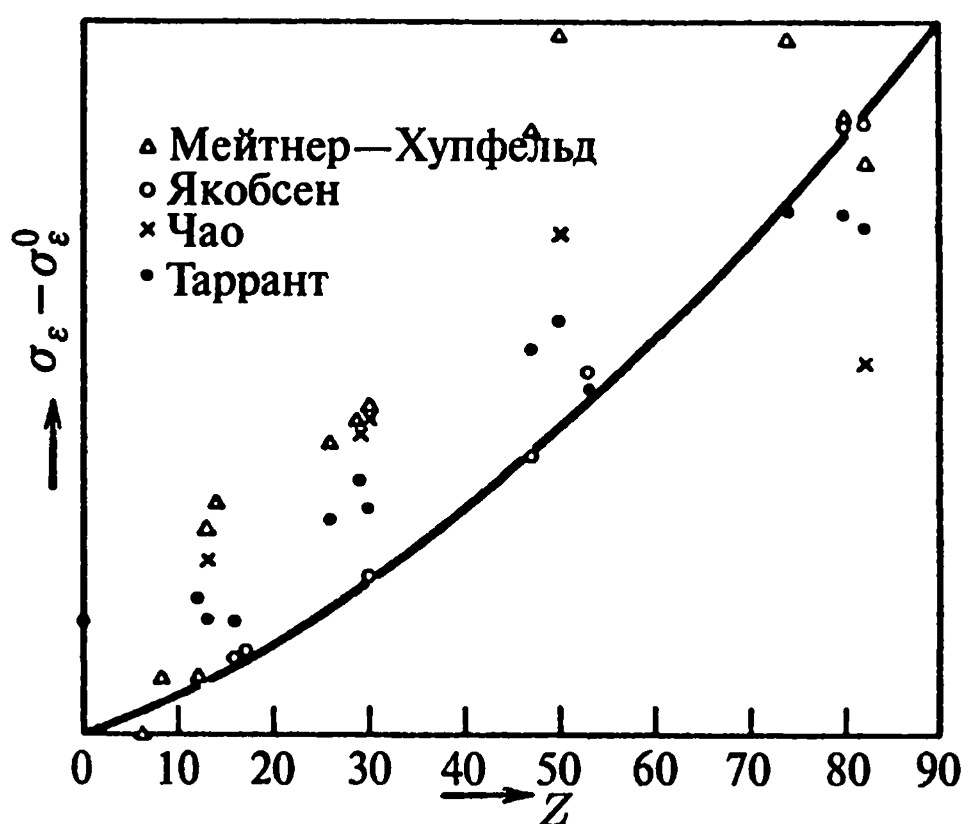


Рис. 3

такую же частоту, как и падающее. Из опытов следует, что при длине волны падающего излучения $\lambda = 4{,}7$ X-ед. получается примерно $\sigma_N = 1{,}5 \cdot 10^{-28}$ см^2. На рис. 3 приведена теоретическая кривая σ_K/n_2, вычисленная для $\sigma_N = 1{,}50 \cdot 10^{-28}$ см^2, вместе со значениями, измеренными Мейтнер и Хупфельдом[6], Якобсеном[7], Чао[8] и Таррантом[9]. При этом из отклонений полного рассеяния, приходящегося на один электрон, от формулы Клейна—Нишины была исключена часть, которую следует относить по формулам Заутера[10] к фотоэффекту на атомных электронах. В соответствии с экспериментальными результатами Мейтнер и Хупфельда[11] значения для тяжелых атомов Pb и Hg, для которых приближенный метод Заутера уже неприменим, были уменьшены нами примерно на 20%; измерение Якобсена для урана было опущено, так как оценить фотоэффект для урана уже невозможно.

Теперь мы вернемся к расчету рассеянного излучения первого типа, обусловленного изменениями в движении протонов и нейтронов. В качестве переменных системы мы возьмем, как и в части I, пространственные координаты частиц $\mathfrak{r}_k$, их спин σ_k и величину ρ_k^ξ, которая указывает, является ли частица протоном $(\rho_k^\xi = -1)$ или нейтроном $(\rho_k^\xi = +1)$.

Энергия взаимодействия ядра с внешним электрическим полем $\mathfrak{E}$ имеет в этом случае вид

$$H_1 = \mathfrak{E} e \sum \mathfrak{r}_k \cdot \frac{1}{2}\left(1 - \rho_k^\xi\right). \qquad (8)$$

Первая часть этой энергии возмущения $\mathfrak{E} \cdot \frac{e}{2} \sum r_k$ соответствует электрической силе, приложенной к центру тяжести ядра и поэтому возбуждающей такое рассеянное излучение, какое испускалось бы элементарной частицей с зарядом $ne/2$ и массой nM. Следовательно, это рассеянное излучение подчиняется формуле Томсона, и при объяснении опытов Мейтнер и Хупфельда его можно не рассматривать ввиду ничтожной интенсивности. Иначе дело обстоит с рассеянием, отвечающим второму члену формулы (8):

$$-\mathfrak{E} \frac{e}{2} \sum r_k \rho_k^\xi.$$

Оно может стать интенсивным, когда частота падающего излучения расположена вблизи некоторой собственной частоты атомного ядра. Для амплитуды вторичного дипольного момента, индуцированного внешним излучением, мы получаем

[6] *Meitner L., Hupfeld H.* Zs. Phys., 1931, **67**, 147.
[7] *Jakobsen J.* Zs. Phys., 1931, **70**, 145.
[8] *Chao C.* Proc. Nat. Acad. Amer., 1930, **16**, 431.
[9] *Tarrant G.* Proc. Roy. Soc. London, 1932, A **135**, 223.
[10] *Sauter F.* Ann. Phys., 1931, **11**, 454.
[11] *Meitner L., Hupfeld H.* Zs. Phys., 1932, **75**, 705.

тогда, как в дисперсионной теории для атомов, следующую формулу (поле $\mathfrak{E}$ предполагается параллельным оси z)

$$M_z(n) = e^2\mathfrak{E}_z \sum_m \frac{\left|\left(\frac{1}{2}\sum_k z_k\rho_k^\xi\right)_{nm}\right|^2 \cdot 2(E_n - E_m)}{(E_n - E_m)^2 - (h\nu)^2}. \tag{9}$$

Здесь E_n означает энергию состояния n, $\left(\frac{1}{2}\sum_k r_k\rho_k^\xi\right)_{nm}$ — матричный элемент суммы $\frac{1}{2}\sum z_k\rho_k^\xi$ для перехода из n в состояние m. Таким образом, рассеянное излучение в местах резонанса $h\nu = |E_n - E_m|$ становится весьма интенсивным, если только матричный элемент для соответствующего перехода случайно не обращается в нуль. Более подробное обсуждение формулы (9) возможно только для какого-нибудь конкретного атомного ядра. Мы возьмем для примера подробно рассмотренный в части I изотоп H с атомным весом 2. Для него матричный элемент $\left(\rho_1^\xi z_1 + \rho_2^\xi z_2\right)_{nm}$ отличается от нуля только тогда, когда одно из двух состояний принадлежит симметричной по ρ^ξ системе термов, а второе — антисимметричной системе. Поскольку основное состояние принадлежит симметричной системе, в рассеянии на основном состоянии участвуют только те возбужденные состояния, волновая функция которых антисимметрична по ρ_1^ξ и ρ_2^ξ. В состояниях такого рода обменный интеграл $J(r)$ приводит к отталкиванию нейтрона от протона; поэтому все соответствующие возбужденные состояния принадлежат непрерывному спектру с положительной энергией. Вследствие этого острый резонанс в обычном смысле в ядре изотопа ^{2}H не существует.

§3
Свойства нейтрона*

В основу настоящей работы была положена гипотеза о том, что нейтрон можно рассматривать как устойчивую элементарную часть ядра; то обстоятельство, что нейтрон в некотором отношении ведет себя так, как будто он состоит из протона и электрона, проявляется только при вычислении обменных сил и при β-распаде. Хотя экспериментальный факт, что при разрушении легких ядер выделяются свободные нейтроны, и говорит в пользу названных выше предположений, все же необходимо подробно обосновать теоретически, почему нейтрон с его малым дефектом массы ($\sim$1 миллион электронвольт) можно рассматривать как устойчивую элементарную частицу в ядре, в котором энергии взаимодействия частиц значительно больше 1 миллиона электронвольт.

В защиту этой гипотезы можно прежде всего сказать, что уже само существование нейтрона противоречит законам квантовой механики в их настоящем виде. Как, впрочем гипотетическая, справедливость статистики Ферми для нейтронов, так и нарушение закона сохранения энергии при β-распаде доказывают неприменимость теперешней квантовой механики к структуре нейтрона. Но даже если отвлечься от этих свойств нейтрона, то, если нейтрон считать состоящим из электрона и протона, квантовой механике будет противоречить тот факт, что нейтрон имеет приблизительно протяженность $\Delta q \sim \frac{e^2}{mc^2}$. Действительно, пространственной области $\Delta q \sim \frac{e^2}{mc^2}$

* На конференции в Копенгагене на Пасху 1932 г. я познакомился с работой проф. Н. Бора «О свойствах нейтрона при соударениях с протонами и электронами», которая скоро будет опубликована и которая многому меня научила. За возможность обсуждения этой работы до ее публикации я хотел бы сердечно поблагодарить Бора.

по соотношениям неопределенности соответствовал бы средний импульс

$$\Delta p \sim \frac{h}{2\pi\Delta q} \sim \frac{hmc^2}{2\pi e^2} = \frac{hc}{2\pi e^2} \cdot mc.$$

Значит, для дефекта массы нейтрона следовало бы ожидать энергию порядка

$$E = c \cdot \Delta p = \frac{hc}{2\pi E^2} \cdot mc^2 \approx 137mc^2,$$

в то время как наблюдаемый дефект массы примерно в сто раз меньше.

Итак, если мы пытаемся вычислить энергию связи электрона в нейтроне, то из *дефекта массы* получаются значения порядка mc^2, а из *размера* нейтрона — значения порядка 137 mc^2.

Для вычисления энергии связи можно привлечь также рассеяние света нейтронами, поставив вопрос, чему равна частота классического осциллятора, который рассеивает γ-лучи с длиной волны $\lambda = 4{,}7$ X-ед. столь же интенсивно, как нейтрон. Эффективное поперечное сечение взаимодействия осциллятора с частотой ν_0 есть

$$\sigma = \frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^2\left(\frac{\nu^2}{\nu_0^2 - \nu^2}\right). \tag{10}$$

Следовательно, по рассеянию мы нашли бы для энергии связи значение, приблизительно отвечающее *размеру* нейтрона, но не эмпирическому *дефекту массы* нейтрона.

Таким образом, резюмируя сказанное выше, можно сказать: однозначно определить понятие «энергия связи» электрона в нейтроне в силу нарушения закона сохранения энергии при β-распаде невозможно. Поскольку, кроме того, применение квантовой механики к нейтрону ведет к противоречиям, мы получаем для энергии связи электрона в нейтроне совершенно различные значения, в зависимости от того, из каких экспериментов мы их определяем. В некотором отношении нейтрон ведет себя как квантовомеханическая система с очень большой энергией связи, однако, его дефект массы очень мал.

Итак, положенное в основу этой работы предположение о том, что нейтрон в ядре можно рассматривать как устойчивую элементарную частицу, заранее не противоречит другим известным свойствам нейтрона, которые, однако, не могут быть описаны правилами квантовой механики.

(*Поступила 30 июля 1932 г.*)

О СТРОЕНИИ АТОМНЫХ ЯДЕР. III*

§ 1. Применение метода Томаса—Ферми к атомному ядру.
§ 2. Рассеяние γ-лучей на атомном ядре.
§ 3. Обсуждение предложений о природе нейтрона.

Опыты Кюри, Жолио и Чадвика, касающиеся существования и стабильности нейтрона, послужили основанием для предпринятой в частях I и II этой работы попытки выяснить роль, которую нейтроны играют в строении атомных ядер при вполне определенных физических допущениях, и проверить эти допущения на фактическом материале ядерной физики. Неполнота существующих на сегодня эмпирических данных ведет в этой проблеме к большой неуверенности даже в самых основах теории, и лишь очень немногие эксперименты допускают определенную интерпретацию. Поэтому нам казалось, что сначала надо выбрать какую-то определенную гипотезу и потом посмотреть, насколько она может привести в порядок опытные данные. Ниже мы также подробно обсудим, какие следствия характерны именно для выбранной гипотезы и в каких пунктах те же результаты получились бы при другом выборе основного предположения. До начала обсуждения мы дополним и в некоторых местах исправим соображения, развитые в первых двух частях.

§ 1

Применение метода Томаса—Ферми к гамильтоновой функции ядра

В основу исследований части I была положена функция Гамильтона, зависящая от пространственных координат ядерных частиц $\mathfrak{r}_k$ и сопряженных им импульсов $\mathfrak{p}_k$, далее от переменных ρ_k^ζ, которые указывают, является ли рассматриваемая частица нейтроном ($\rho_k^\zeta = +1$) или протоном ($\rho_k^\zeta = -1$). К введенным в уравнении (1) части II членам энергии взаимодействия $J(r_{kl})$ и $K(r_{kl})$ мы, завершая аналогию с взаимодействиями молекул, добавим теперь «статическое» взаимодействие между нейтроном и протоном $L(r_{kl})$, соответствующее электростатической части энергии связи, например, H и H^+ в ионе H_2^+. В части I этот член был опущен как предположительно малый. Полная функция Гамильтона теперь имеет вид

$$H = \frac{1}{2M}\sum_k \mathfrak{p}_k^2 - \frac{1}{2}\sum_{k>l} J(r_{kl})(\rho_k^\xi\rho_l^\xi + \rho_k^\eta\rho_l^\eta) + \\ + \frac{1}{2}\sum_{k>l} L(r_{kl})(1-\rho_k^\zeta\rho_l^\zeta) - \frac{1}{4}\sum_{k>l} K(r_{kl})(1+\rho_k^\zeta)(1+\rho_l^\zeta) + \\ + \frac{1}{4}\sum_{k>l}\frac{e^2}{r_{kl}}(1-\rho_k^\zeta)(1-\rho_l^\zeta) - \frac{1}{2}D\sum_k(1+\rho_k^\zeta). \quad (1)$$

* Über den Bau der Atomkerne. III. — Zs. Phys., 1933, **80**, 587–596. *Перевод А. А. Сазыкина.*

По аналогии с методом Томаса—Ферми уравнение (1) для ядер с большим числом частиц может быть решено следующим приближенным методом. Сначала мы находим известным образом соответствующую уравнению (1) функцию Шредингера для нормального состояния, решая задачу на минимум

$$\int \psi^* H \psi \, d\Omega = \min . \tag{2}$$

при дополнительном условии

$$\int \psi^* \psi \, d\Omega = 1. \tag{3}$$

Допуская в задаче на минимум (2) только такие функции Шредингера, для которых величина

$$4P(P+1) = \Big(\sum_k \rho_k^\xi\Big)^2 + \Big(\sum_k \rho_k^\eta\Big)^2 + \Big(\sum_k \rho_k^\zeta\Big)^2 \tag{4}$$

(т. е., так сказать, полный «ρ-спин»), имеет определенное численное значение[1], мы находим, что при сделанном также в части I предположении о положительности функции $J(r_{kl})$ к самому глубокому уровню энергии приводит значение $2P = n = n_1 + n_2$. В этом приближении функция ψ может быть записана в виде

$$\psi(\mathfrak{r}_1\rho_1^\zeta, \ldots, \mathfrak{r}_n\rho_n^\zeta) = \varphi(\mathfrak{r}_1, \ldots, \mathfrak{r}_n) f(\rho_1^\zeta, \ldots, \rho_n^\zeta). \tag{5}$$

Здесь f означает симметричную функцию переменных ρ_k^ξ, вид которой может быть найден по обычным правилам квантовой механики, если сумма $\sum_k \rho_k^\zeta = n_1 - n_2$ задана.

Функция φ тогда будет шредингеровской собственной функцией Гамильтона, которая получается из (1) в результате замены всех зависящих от ρ_k выражений на их средние значения при $P = n/2$, $P^\zeta = \sum \rho_k^\zeta = n_1 - n_2$. Для этих средних значений мы находим

$$\begin{gathered}
\overline{\rho_k^\xi\rho_l^\xi + \rho_k^\eta\rho_l^\eta} = 4\frac{n_1n_2}{n(n-1)}, \quad \overline{1 - \rho_k^\zeta\rho_l^\zeta} = 4\frac{n_1n_2}{n(n-1)}, \\
\overline{(1+\rho_k^\zeta)(1+\rho_l^\zeta)} = 4\frac{n_1(n_1-1)}{n(n-1)}, \quad \overline{(1-\rho_k^\zeta)(1-\rho_l^\zeta)} = 4\frac{n_2(n_2-1)}{n(n-1)}, \\
\sum_k (1+\rho_k^\zeta) = 2n_1 \quad (k \neq l).
\end{gathered} \tag{6}$$

Таким образом, гамильтонова функция для φ имеет вид

$$\begin{aligned}
H = \frac{1}{2M}\sum \mathfrak{p}_k^2 - 2\frac{n_1n_2}{n(n-1)}\sum_{k>l}[J(r_{kl}) - L(r_{kl})] - \\
- \frac{n_1(n_1-1)}{n(n-1)}\sum_{k>l} K(r_{kl}) + \frac{n_2(n_2-1)}{n(n-1)}\sum_{k>l}\frac{e^2}{r_{kl}} - n_1 D.
\end{aligned} \tag{7}$$

[1] Аналогичным образом по Слэтеру (*Slater J. C.* Phys. Rev., 1930, **35**, 210) метод Хартри для атомов можно понимать как приближенный метод решения задачи на минимум, в котором допускаются функции Шредингера только некоторого определенного простого вида.

Свойства симметрии функции $\varphi(\mathfrak{r}_1, \dots, \mathfrak{r}_n)$ по отношению к перестановкам координат частиц определяются, как и в случае атомов, принципом Паули. Атомное ядро в соответствии с формулой (7) можно рассматривать как механическую систему, состоящую из однородных материальных точек, причем энергия взаимодействия двух материальных точек определяется формулой

$$U(r) = -2\frac{n_1 n_1}{n(n-1)}[J(r) - L(r)] - \frac{n_1(n_1-1)}{n(n-1)}K(r) + \frac{n_2(n_2-1)}{n(n+1)}\frac{e^2}{r}. \tag{8}$$

Если мы, в согласии с представлениями метода Томаса—Ферми, будем теперь рассматривать ядро как газ свободных частиц, которые подчиняются статистике Ферми и удерживаются вместе силами (8), причем $\rho(\mathfrak{r})$ означает число частиц в единице объема, мы получим

$$E_{\text{кин}} = \frac{h^2}{M}\frac{4\pi}{5}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{5/3}\int \rho(\mathfrak{r})^{5/3} d\tau, \tag{9}$$

а для полной энергии атомного ядра найдем

$$E = \frac{h^2}{M}\frac{4\pi}{5}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{5/3}\int \rho(\mathfrak{r})^{5/3} d\tau + \frac{1}{2}\iint \rho(\mathfrak{r})\rho(\mathfrak{r}')U(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)\,d\tau d\tau' - n_1 D. \tag{10}$$

Распределение плотности $\rho(\mathfrak{r})$ определяется требованием, чтобы энергия E имела минимум при дополнительном условии

$$\int \rho(\mathfrak{r})\,d\tau = n.$$

Разумеется, применяя метод Томаса—Ферми, следует учитывать, что аппроксимационное выражение (10) для энергии правильно только при известных ограничениях. Если, например, функция $U(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)$, по своему профилю похожая на гору Гамова, а при больших n_1 и n_2 зависящая только от отношения n_1/n_2, вдруг стала бы чрезвычайно сильно возрастать где-то при малых $|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|$, т. е. если дальнейшему сближению двух частиц препятствовали бы очень большие силы отталкивания, то интеграл

$$\iint \rho(\mathfrak{r})\rho(\mathfrak{r}')U(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)\,d\tau\,d\tau'$$

был бы расходящимся или во всяком случае давал бы совершенно неверные значения потенциальной энергии, так как в действительности две частицы не могут подойти друг к другу на расстояние ближе некоторого критического. В этом случае мы получим намного лучшее приближение к действительности, вводя, по аналогии с постоянной «b» уравнения Ван дер Ваальса, минимальное расстояние между двумя частицами вместе с соответствующей ему максимальной плотностью ρ_0, для чего в потенциальной энергии следует приравнять нулю функцию $U(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)$ для значений $|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|$, меньших минимального расстояния между двумя частицами. Тогда в кинетической энергии вместо $\rho^{5/3}$ (число частиц в кубическом сантиметре ρ, умноженное на среднюю энергию отдельной частицы $\rho^{2/3}$) в точной аналогии с уравнением Ван дер Ваальса мы получим $\rho\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\rho_0}\right)^{-2/3}$. Вместо уравнения (10) мы тогда получим более общее уравнение

$$E = \frac{h^2}{M}\frac{4\pi}{5}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{5/3}\int\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\rho_0}\right)^{2/3}\rho\,d\tau + \frac{1}{2}\int \rho(\mathfrak{r})\rho(\mathfrak{r}')U_0(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)\,d\tau d\tau' - n_1 D, \tag{11}$$

причем вместо U сделана подстановка U_0, показывающая, что из функции $U(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)$ должны исключаться значения, соответствующие аргументам $|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|$ меньше минимального расстояния. Варьируя ρ с учетом дополнительного условия $\int \rho\, d\tau = n$, мы получаем из (11) соотношение

$$\frac{h^2}{M}\frac{4\pi}{3}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{5/3}\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\rho_0}\right)^{5/3}\left(\frac{1}{\rho}-\frac{3}{5\rho_0}\right)+\int \rho(\mathfrak{r}')U_0(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)\, d\tau' - \lambda = 0. \qquad (12)$$

Умножая уравнение (12) на $\frac{d\rho}{dn}$ и интегрируя по $d\tau$, мы находим из (11) и (12)

$$\lambda = \frac{dE}{dn}. \qquad (13)$$

При этом сделано предположение, что $U_0(\mathfrak{r})$ не зависит от n. Уравнение (12) справедливо только в области, в которой плотность ρ отлична от нуля. Вне этой области состояние системы полностью определяется требованием $\rho = 0$. Умножая уравнение (12) на $\frac{1}{2}\rho$ и выполняя интегрирование, мы получаем

$$\frac{h^2}{M}\frac{2\pi}{3}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{5/3}\int\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\rho_0}\right)^{2/3}\left(\rho+\frac{2}{5}\frac{\rho^2}{\rho_0-\rho}\right)d\tau + \\ + \frac{1}{2}\iint \rho(\mathfrak{r})\rho(\mathfrak{r}')U_0\, d\tau\, d\tau' - \frac{n}{2}\frac{dE}{dn} = 0. \qquad (14)$$

После сравнения с (11) находим

$$E - \frac{n}{2}\frac{dE}{dn} = \frac{h^2}{M}\frac{2\pi}{15}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{5/3}\left[\int\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\rho_0}\right)^{2/3}\rho\, d\tau - 2\int\frac{\rho}{\rho_0}\left(\frac{1}{\rho}-\frac{1}{\rho_0}\right)^{5/3}d\tau\right]. \qquad (15)$$

Применяя эту формулу для обсуждения зависимости массовых дефектов от n_1 и n_2 и основываясь на измерениях Астона, мы придем прежде всего к выводу, что для ядер существует максимальная плотность ρ_0, которая по порядку величины должна совпадать с плотностью α-частицы. Действительно, пока, как в обычном методе Томаса—Ферми, можно полагать $1/\rho_0 \ll 1/\rho$, правая часть уравнения (15) положительна, и поэтому величина $-E$ как функция n должна возрастать быстрее, чем $\mathrm{const}\cdot n^2$. Однако на опыте $-E$ для малых n возрастает примерно пропорционально n, для больших n еще медленнее. Следовательно, функция $U(|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|)$ для убывающих значений $|\mathfrak{r}-\mathfrak{r}'|$ в области малых расстояний возрастает, очевидно, очень сильно. Для тяжелых ядер отсюда можно сделать вывод, что плотность в большей части ядра по значению близка к ρ_0, а в сравнительно малой области на периферии она спадает до нуля. Поэтому, если функции $J(r_{kl})$, $K(r_{kl})$, $L(r_{kl})$ быстро убывают с расстоянием, для больших n ($n_1/n_2 = \mathrm{const}$) энергия в соответствии с уравнением (15) может быть представлена в виде

$$E = -an + bn^{5/3} + c, \qquad (16)$$

как неявно предполагалось в первой части I при обсуждении кривых устойчивости. (При этом член $-an$ обусловлен быстро убывающими, член $bn^{5/3}$ — кулоновским силами.)

Поскольку по соображениям симметрии задачи плотность $\rho(r)$ должна быть сферически симметричной, было бы не очень трудно и в общем случае найти приближенные решения для $\rho(r)$ при заданной функции $U(r)$. Пока же мы,

наоборот, будем пытаться делать выводы о виде функции $U(r)$ по экспериментально найденным дефектам массы.

Распространяя только что проведенное рассмотрение mutatis mutandis[2] на атомное ядро, построенное из α-частиц и нейтронов, мы можем связывать параболический подъем кривой отнесенных к Не дефектов массы в области легких ядер с тем, что для $\rho \ll \rho_0$ величина $-E$ должна возрастать сильнее, чем $\text{const} \cdot n^2$. Дальнейшее замедление подъема кривых указывает и здесь на то, что между α-частицами существует минимальное расстояние (в рамках характерного для применяемого метода приближения).

§2

Рассеяние γ-лучей на атомном ядре

Экспериментально исследованное Таррантом, Мейтнер, Хупфельдом, Чао и Якобсеном[3] рассеяние жестких γ-лучей на атомных ядрах было интерпретировано в части II как когерентное рассеяние нейтронами, которое еще может быть модифицировано в местах резонанса рассеянием на протонах, в общем случае пренебрежимо малым. В пользу этого объяснения говорит экспериментальный факт, что интенсивность рассеянного излучения приблизительно пропорциональна квадрату числа нейтронов. Однако сделанный отсюда вывод, будто частота рассеянного света должна совпадать с частотой падающего излучения (рэлеевское рассеяние[4]), основан на ошибке, которая будет теперь исправлена.

В многоатомных молекулах электронные облака отдельных атомов колеблются в фазе и при рамановском рассеянии. Следовательно, пока атомное ядро можно сравнивать с молекулой (см. об этом § 3), интенсивность рамановского света, возникающего при когерентном рассеянии нейтронами, также будет пропорциональной квадрату числа нейтронов.

При этом сравнении нейтроны соответствуют атомам с их электронными облаками, а излучение, рассеянное протонами, в обоих случаях не учитывается. Энергию падающих световых квантов в случае молекул и ядер можно считать малой по сравнению с энергией отрицательного заряда с тяжелыми массами; в соответствии с частью II энергия связи нейтрона должна иметь значение порядка 137 mc^2. Поляризуемость атома приблизительно определяется его объемом; по аналогии с этим из $\sigma_N = 1{,}5 \cdot 10^{-28}\text{см}^2$ при $h\nu = 5{,}15mc^2$ (см. часть II, с. 510) для поляризуемости нейтрона получается

$$\alpha_N = \left(\frac{c}{2\pi\nu}\right)^2 \sqrt{\frac{3\sigma_N}{8\pi}} = 10{,}7 \cdot \left(\frac{e^2}{mc^2}\right)^3. \tag{17}$$

Значение α_N в рассматриваемой здесь области частот ($h\nu \ll 137mc^2$) уже не должно сильно зависеть от ν, и поэтому сечение σ_N должно возрастать примерно пропорционально четвертой степени ν. То обстоятельство, что поляризуемость нейтрона оказывается, по-видимому, примерно в десять раз больше его объема, связано, быть может, с чуждыми теперешней теории особенностями в структуре нейтрона.

---

[2] Вместе с необходимыми изменениями. — *Ред.*

[3] *Tarrant G.* Proc. Roy. Soc. London, 1930, **A 128**, 345; 1932, **A 135**, 223; *Meitner L.*, *Hupfeld H.* Naturwiss., 1930, **18**, 534; Zs. Phys., 1930, **67**, 147; *Chao C.* Proc. Nat. Acad. Amer., 1930, **16**, 431; *Jacobsen J.* Zs. Phys., 1930, **70**, 145.

[4] См. по этому поводу, с одной стороны, *Meitner L.*, *Hupfeld H.* Zs. Phys., 1932, **75**, 705; с другой стороны, *Gray L.*, *Tarrant G.* Proc. Roy. Soc. London, 1932, **A 136**, 662.

Если считать, что нейтроны и протоны в ядре покоятся, то под влиянием излучения, длина волны которого велика по сравнению с размерами ядра, ядро будет испускать когерентное рэлеевское рассеянное излучение, интенсивность которого растет пропорционально квадрату числа нейтронов; конечно, при достаточно плотном расположении частиц дипольный момент отдельного нейтрона — а с ним и интенсивность рассеянного излучения — может изменяться под воздействием, которое оказывают на нейтрон другие частицы своими сильными электрическими полями (ср. размагничивающий фактор в ферромагнитах!), частью силами, характерными для ядер, но не описываемыми теперешней теорией.

По этой причине характер рассеянного излучения изменяется, когда нейтроны и протоны в ядре движутся; тогда амплитуда рэлеевского излучения периодически варьируется вследствие меняющегося расстояния между частицами в ядре, частота рассеянного излучения расщепляется на несколько частот — в точной аналогии с рамановскими спектрами молекул[5]. Для полной интенсивности рассеяния в молекулах действует простое правило сумм: сумма квадратов амплитуд различных рассеянных волн равна среднему значению квадрата амплитуды рэлеевского света, если усреднение выполняется для покоящихся частиц по всем их положениям (со статистическим весом, задаваемым волновой функцией). Это правило сумм действует и для атомного ядра; если падающее излучение имеет частоту такого же порядка, как колебания частиц, то правило остается еще в силе для квадратов амплитуд осцилляторов, но уже не для интенсивности рассеянного излучения. В одном пункте атомные ядра в молекуле существенно отличаются от молекул: в то время как атомы в молекуле колеблются вокруг своих положений равновесия с относительно малыми амплитудами, в ядре расстояние между нейтронами и протонами изменяется периодически на величины порядка самого расстояния, как это следует из предложенного Бором[6] соотношения между размерами ядра и дефектом массы. Поэтому в случае молекул рамановский свет существенно слабее рэлеевского рассеянного, а в атомных ядрах эти виды рассеяния могут быть одинаково интенсивными. Таким образом, полное рассеяние на ядре в соответствии с рассмотрением в части II будет возрастать пропорционально квадрату числа нейтронов и четвертой степени частоты падающего излучения (ср. экспериментально очень большое различие ядерного рассеяния для $\lambda = 6{,}7 \cdot 10^{-11}$ см и $\lambda = 4{,}7 \cdot 10^{-11}$ см), но интенсивность распределяется частями одного порядка величины между несмещенной линией и рамановскими линиями, смещенными в сторону длинных волн. Кроме этого рассеянного излучения в экспериментах должен появляться еще свет с частотой собственных колебаний ядра, так как ядро после акта рассеяния, по Смекалу, всегда остается в возбужденном состоянии.

§ 3
Обсуждение предположений о природе нейтрона

Защищаемое здесь представление о природе нейтрона однозначно не следует из экспериментов. Например, опыты по расщеплению позволяют также представлять нейтрон как неразложимую элементарную частицу вроде протона и электрона[7]. Это предположение будет проявляться в гамильтоновой функции прежде всего в том, что обменные члены $(J(r_{kl}))$ тогда отпадут, и останется только одна энергия взаимодействия протона и нейтрона $(L(r_{kl}))$. По вопросу

[5] См., в частности, работу *Placzek G.* Zs. Phys., **70**, 84.

[6] *Bohr N.* Atomic stability and conservation laws. Convegno di Fisika Nucleare. Rom, 1932.

[7] См., например, *Perrin M.* C. R. Acad. Sci., 1932, **194**, 1343.

о дефектах массы и о структуре легких ядер оба предположения приводят к сходным результатам; в приближенное решение § 1 (уравнение (7)) даже $J(r_{kl})$ и $L(r_{kl})$ входят в точности одинаковым образом, откуда следует, что качественные выводы в частях I и II могут быть получены из обоих предположений. Иначе обстоит дело для тяжелых ядер, испускающих β-лучи; в случае предположения о неразложимых нейтронах они должны содержать в качестве элементарных частиц также электроны. В этом случае, в противоположность защищаемому здесь представлению, зная массу, нельзя было бы делать выводы о статистике ядра и о целочисленности или полуцелочисленности его спина, в то время как имеющиеся до сих пор эксперименты, по-видимому, подтверждают такую возможность. Важный вклад в решение этого вопроса мог бы дать анализ сверхтонкой структуры MTh_2, ThC и ThC″.

Факт непрерывности спектров β-лучей приводит к еще одной трудности. Если электроны играют в ядре роль самостоятельных элементарных частиц, то следует ожидать, что размытие энергии электронов, проявляющееся в непрерывных β-спектрах, будет переходить также на излучаемые при распаде α-частицы вследствие тесного взаимодействия электронов с α-частицами. Ведь никоим образом не очевидно, что тяжелые элементарные частицы во всех отношениях ведут себя как составные части квантовомеханической системы с точно определенной энергией взаимодействия; протоны связаны друг с другом только своим отрицательным зарядом, поведение которого в ядре лежит вне области применимости квантовой механики. Тем не менее открытие устойчивости нейтрона, не поддающейся описанию в существующей теперь теории, позволяет провести четкую границу между областью, доступной для квантовой механики, и недоступной для нее областью, так как в силу этой устойчивости из протонов и нейтронов удается строить чисто квантовомеханические системы, в которых новые черты, проявляющиеся в β-распаде, не приводят к трудностям. Такая возможность четкого разграничения между квантовомеханическими и новыми, характерными для ядерной физики, чертами, по-видимому, утрачивается, если электроны считать самостоятельными ядерными частицами.

Для γ-излучения обсуждаемое здесь представление, согласно которому нейтрон как тяжелая элементарная частица не может вносить существенный вклад в рассеяние, ведет к такому следствию: поскольку интенсивность рассеянного излучения оказывается приблизительно пропорциональной квадрату атомного номера, то α-частицы в ядре должны были бы состоять из протонов и электронов (не из протонов и нейтронов), и электроны, связанные в α-частице, должны были бы давать в рассеянное γ-излучение, несмотря на большую энергию связи, по меньшей мере такой же вклад, как и свободные ядерные электроны.

С другой стороны, неясно, будут ли возникать трудности при последовательном проведении предлагаемых в этой серии работ допущений. Предположение, что по спину и статистике нейтрон эквивалентен элементарной частице, а по поляризуемости, разложимости и т. д. проявляет свойство сложной системы, ставит перед нами проблему: как слить воедино свойства двух типов, несоединимые в квантовой механике; хотя совсем необязательно думать, что переход от нейтрона к квантовомеханической системе из протона и электрона не может быть непрерывным в смысле существования возбужденных состояний нейтрона, возможность непротиворечивого слияния остается совершенно неясной.

Особенно отчетливо эта трудность проявляется в вопросе о том, какое свойство ядра приводит к устойчивости нейтрона по отношению к β-распаду. В части I была сделана попытка ввести энергетический критерий устойчивости, хотя из непрерывности β-спектров Бор сделал вывод о нарушении закона сохранения энергии. Правда, указанная попытка сохранить некоторые следствия закона сохранения энергии даже по ту сторону границы его действия логически вполне возможна (примером может служить строгая применимость классических правил отбора также

и в квантовой механике); однако произвол, с которым она связана, оставляет нам мало надежды на то, что уже теперь может быть найдена формулировка, которая раньше или позже не приведет к внутренним противоречиям; наверное, к самой неясной части проведенного здесь исследования.

В этой связи необходимо еще выяснить значение того факта, что критические значения отношения n_1/n_2 (см. часть I, §5), характеризующие начало β-неустойчивости, внутри каждого из радиоактивных рядов постоянны. Ведь из энергетического критерия на первый взгляд не следует, что эти значения должны быть постоянными; напротив, они приближенно определяются по формуле (8) части I[8]; оказывается, что по этой формуле вторая β-неустойчивость в цепочке радиоактивного распада должна была бы наступать перед B-продуктом[9] на расстоянии от одного до трех атомных номеров. Однако при последовательном рассмотрении условий устойчивости по Истмену[10] оказывается, что критическая кривая для β-распада должна идти более полого. Критическое отношение n_1/n_2 в интервале от первой до второй β-неустойчивости изменяется тогда только на величину около 0,01; для рядов тория и актиния это согласуется с данными таблицы 1 в части I, для ряда радия вычисленное значение лежит между экспериментальными данными для RaB и RaD. Правда, сходство между тремя рядами распада (например, выделенное положение порядкового числа 82, на котором заканчивается α-распад), выходящее за пределы энергетического критерия, указывает на то, что для понимания радиоактивных рядов необходимо детально рассматривать такие свойства структуры ядер, которые не определяются отношением n_1/n_2.

(*Поступила 22 декабря 1932 г.*)

---

[8] Указанные в части I значения постоянных C_1 и C_2 из-за ошибки не согласуются с рис. 1. Соответствующие кривой на рисунке численные постоянные имеют значения: $C_1 = 1{,}16$; $C_2 = 0{,}0313$.

[9] На это мне дружески указал Н. Бор.

[10] См. появляющуюся в скором времени работу С. Истмена (*S. Eastman*), которому я выражаю благодарность за сообщение его результатов.

Часть VI

ТЕОРИЯ КОСМИЧЕСКИХ ЛИВНЕЙ

33 Зак. 6

К ТЕОРИИ «ЛИВНЕЙ» В ВЫСОТНОМ ИЗЛУЧЕНИИ*

Теория β-распада Ферми позволяет дать образованию «ливней» качественное объяснение, следствия из которого подробно обсуждаются ниже.

Современная квантовая электродинамика не дает объяснения тому факту, что частицы очень высокой энергии могут производить в одном единственном акте большое число вторичных частиц, как это наблюдалось в многочисленных экспериментах с высотным излучением [1)]. Ведь вычисленные по квантовой электродинамике эффективные сечения одновременного возникновения n пар частиц всегда содержат множитель $(e^2/\hbar c)^n$, так что вероятность образования больших ливней должна быть исчезающе малой.

Формальную причину этого следствия квантовой электродинамики можно без труда увидеть, обратившись к ее основным уравнениям. Если ввести для описания электромагнитных полей переменные

$$\varphi_i = \frac{1}{\sqrt{\hbar c}}\mathfrak{A}_i, \quad \pi_i = \frac{1}{\sqrt{\hbar c}}\mathfrak{E}_i, \tag{1}$$

а вместо энергии взять величину

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar c},$$

то — опуская несущественные для нашего рассмотрения вычитаемые величины теории позитронов — мы получим

$$\begin{gathered}\varepsilon = \int dV \left\{ i\psi^* \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i}\psi - \frac{mc}{\hbar}\psi^*\beta\psi - \sqrt{\frac{e^2}{\hbar c}}\psi^*\alpha_i\psi\varphi_i + \frac{1}{2}\left[\pi_i^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k} - \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i}\right)^2\right]\right\}; \\ \psi^*(P)\psi(P') + \psi(P')\psi^*(P) = \delta_{PP'}; \\ \pi_i(P)\varphi_k(P') - \varphi_k(P')\pi_i(P) = -\delta_{PP'}\delta_{ik}.\end{gathered} \tag{2}$$

В этих формулах ε и φ имеют размерность см$^{-1}$, ψ — см$^{-3/2}$, π — см$^{-2}$. За исключением массы покоя, играющей крайне незначительную роль при высоких энергиях рассматриваемых частиц, в системе уравнений (2) не содержится каких-либо универсальных постоянных, которые могли бы определять масштаб физических процессов. Величина же $e^2/\hbar c$ безразмерна, а ее численное значение

---

* Zur Theorie der “Schauer” in der Höhenstrahlung. — Zs. Phys., 1936, **101**, 533–540. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1)] См., например, с одной стороны, наблюдавшиеся Г. Гофманом и его сотрудниками «толчки» и, с другой стороны, снимки П. М. С. Блэккета в камере Вильсона.

будущая теория, возможно, сумеет вычислить. Поэтому в теории возмущений, в которой взаимодействие считается малым, естественно искать решение в форме разложения в ряды по степеням $e^2/\hbar c$, и тогда упомянутый результат квантовой электродинамики, касающийся одновременного возникновения нескольких частиц, сразу станет качественно понятным.

Однако совершенно иначе выглядит обобщенная схема теории материи, содержащая в качестве элементарных частиц электроны, протоны, нейтроны и нейтрино, причем между этими частицами имеет место взаимодействие, аналогичное тому, которое Ферми положил в основу своей теории β-распада[2]. Опуская элетромагнитную часть энергии, мы получаем тогда для ε:

$$\varepsilon = \int dV \Big\{ i\psi^*_{\text{эл}} \alpha_i \frac{\partial}{\partial x_i} \psi_{\text{эл}} - \psi^*_{\text{эл}} \beta \frac{mc}{\hbar} \psi_{\text{эл}} + \text{соответственные выражения для протонов, нейтронов и нейтрино} + f\psi^*_{\text{эл}} \alpha_\lambda \psi_{\text{нейтрино}} \psi^*_{\text{протон}} \alpha_\lambda \psi_{\text{нейтрон}} + \text{компл. сопряж.} \Big\}. \quad (3)$$

Это уравнение существенно отличается от системы (2) тем, что взаимодействие содержит величину f с размерностью см^2, и поэтому даже в области, где можно пренебречь массой покоя, величина f задает для физических процессов масштаб длины (наша величина f соответствует величине $g/\hbar c$ в теории Ферми). Это должно приводить к тому, что взаимодействие между частицами, имеющими длину волны значительно меньше характерной длины $\sqrt{f}$, будет качественно отличаться от взаимодействия между частицами с большой длиной волны. Формально это означает, что теория возмущений, в которой взаимодействие считается малым, будет иметь вид разложения в ряд по степеням fk^2, где k — волновое число рассматриваемых частиц, т. е. $2\pi/\lambda$. Таким образом, сходимость теории возмущений полностью зависит от значения k, и для частиц очень высокой энергии испускание большого числа вторичных частиц может быть не менее вероятным, чем испускание лишь нескольких частиц.

Мы поясним эту ситуацию на примере частного случая, когда протон сталкивается с ядром, которое может быть заменено центральным полем заряда Z. При столкновении из протона могут образоваться:

нейтрон + позитрон + нейтрино, или

протон + электрон + позитрон + 2 нейтрино, или

....

протон + n электронов + n позитронов + $2n$ нейтрино.

Эффективные сечения этих процессов можно оценить по методу Борна, причем следует учитывать, что рассматриваемые процессы могут происходить только тогда, когда ядру передается при ударе часть импульса вследствие кулоновского взаимодействия с заряженными частицами.

Тогда мы получим, как и следует ожидать также из простых соображений размерности, следующие эффективные сечения переходов:

---

[2] *Fermi E.* Zs. Phys., 1934, **88**, 161.

протон →

нейтрон + позитрон + нейтрино $Q \sim \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 f^2k^2,$

протон + электрон + позитрон + 2 нейтрино $Q \sim \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 f^4k^6$ (4)

....

протон + n электронов + n позитронов + $2n$ нейтрино $Q \sim \left(\frac{Ze^2}{\hbar c}\right)^2 f^{4n}k^{8n-2}.$

В этих формулах k приближенно означает среднее волновое число частиц, возникающих в рассматриваемом процессе. Из этой оценки видно, что для значений k порядка $f^{-1/2}$ множественные процессы становятся столь же вероятными, как и более простые; можно даже прийти к выводу о том, что протон, энергия которого очень велика по сравнению с $\hbar c/\sqrt{f}$, сравнительно часто рождает большое число частиц, причем средняя энергия отдельной частицы по порядку величины составляет $\hbar c/\sqrt{f}$; этот процесс подробнее будет еще рассмотрен в дальнейшем. При энергии порядка $\hbar c/\sqrt{f}$ метод Борна, естественно, уже неприменим для вычисления эффективных сечений, и потому определение в формулах (4) точных численных коэффициентов лишено какого-либо смысла.

Таким образом, теория Ферми дает качественное объяснение возникновению ливней и к тому же позволяет сделать количественные утверждения, что средняя ливневых частиц по порядку величины должна составлять $\hbar c/\sqrt{f}$ и что эффективное сечение возникновения ливня по порядку величины должно быть равно f. Если мы возьмем $f = g/\hbar c$ из работы Ферми: $g = 4{,}10^{-50}$ эрг · см^3, то получим (M — масса протона)

$$\frac{\hbar c}{\sqrt{f}} = 580Mc^2, \quad (5)$$

что, конечно, слишком много по сравнению с экспериментальными данными. Однако это расхождение может быть связано с тем отмечавшимся уже не раз обстоятельством, что выраженное в единицах размеров ядра значение g в теории Ферми неправдоподобно мало, вследствие чего, например, обменные силы, рассчитанные по этой теории, оказываются значительно слабее сил, действительно определяющих строение ядер. Как известно, эту трудность можно устранить, вводя вместо взаимодействия Ферми другое взаимодействие, содержащее производные волновых функций нейтрино или электронов[3]. Если добавить к энергии взаимодействия еще s производных, как это сделали Конопинский и Уленбек[4], то коэффициент обменного взаимодействия f', обладающий размерностью см$^{2+s}$, будет отличаться от коэффициента Ферми f множителем $(\hbar/mc)^s$. Тогда среднюю энергию ливневых частиц по порядку величины можно будет оценить следующим образом:

$$\bar{E} \sim \hbar c f'^{-1/(2+s)}. \quad (6)$$

Численно для различных значений s получается:

s	=	0	1	2	3
$\frac{\bar{E}}{Mc^2}$	$\sim$	580	5,7	0,31	0,14

[3] *Bethe G., Peierls R.* Bericht vom Kongress in London, 1934.

[4] *Konopinski E. T., Uhlenbeck G. E.* Phys. Rev., 1935, **48**, 7, 107.

Таким образом, предположение, что $s = 2$ или 3, дает для энергии ливневых частиц значения, по порядку величины соответствующие экспериментальным. Хотя форма непрерывных β-спектров по Конопинскому и Уленбеку свидетельствует скорее в пользу $s = 1$, однако последнее слово о форме энергии взаимодействия, ответственного за β-распад, безусловно, еще не сказано. Эффективное сечение образования ливня в соответствии с приведенными здесь соображениями должно примерно совпадать с квадратом длины волны ливневых частиц средней энергии; поэтому оно должно иметь порядок величины 10^{-26} см^2.

Качественное представление о возникновении ливня, конечно, в очень грубых чертах, можно получить, рассматривая волновое уравнение в полуклассическом приближении. При этом мы будем исходить из упрощающего предположения о том, что имеются частицы только одного типа, между которыми существует взаимодействие четвертого порядка следующего вида

$$f'\psi^*\psi\psi^*\frac{\partial^s\psi}{\partial x^s}. \tag{7}$$

Кроме того, вместо перестановочных соотношений мы будем применять подходящие условия нормировки. Тогда столкновение двух частиц можно наглядно рассматривать как столкновение двух волновых пакетов, причем волновые пакеты не должны быть очень большими по сравнению с длинами волн, а нормировка их должна быть такой, чтобы они имели энергию $h\nu = \hbar ck = hc/\lambda$. Такие волновые пакеты будут проходить друг через друга почти без возмущения, при условии, что их длины волн намного больше характеристической длины $l = f'^{1/(2+s)}$; в этом случае энергия взаимодействия останется малой по сравнению с обычными величинами $\psi^*\alpha_i\frac{\partial}{\partial x_i}\psi$. Если же длины волн пакетов становятся малыми по сравнению с характеристической длиной l, то вследствие обусловленного нормировкой увеличения амплитуды слагаемые, ответственные за взаимодействие при столкновении, превышают все другие составляющие энергии (до столкновения энергия взаимодействия вследствие релятивистской инвариантности равна нулю, потому что отдельная частица не может иметь определенного значения энергии). Происходящий затем процесс уже не имеет ничего общего с распространением волн; нелинейное дифференциальное уравнение скорее всего будет иметь следствием некое трудно обсуждаемое в деталях нерегулярное изменение волновой функции пакетов, при котором исходный периодический характер волновой функции в пакетах в общем случае исчезает. Однако с течением времени энергия, сконцентрированная в двух волновых пакетах, все же будет каким-то образом расплываться в некоторой большой области пространства V' до тех пор, пока энергия взаимодействия, наконец, снова не станет исчезающе малой. Тогда этот энергетический пакет будет распадаться на отдельные частицы, имеющие волновые числа k' в окрестности $V'^{-1/3}$. Объем области V' следует определять из условия, что энергия взаимодействия возникших частиц должна быть точно равна обычной энергии свободных частиц. В следующих оценках k означает волновое число сталкивающихся частиц, k' — среднее волновое число и n — количество частиц в ливне (массы покоя частиц ливня принципиально не учитываются).

Из закона сохранения энергии следует

$$2k = nk'. \tag{8}$$

Условие, что энергия взаимодействия должна быть чуть меньше обычной энергии свободных частиц, приводит к уравнению

$$\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial x} \sim f'\psi^*\psi\psi^*\frac{\partial^s\psi}{\partial x^s}, \tag{9}$$

и так как

$$\psi^*\psi \sim \frac{n}{V'}, \quad k' \sim V'^{-1/3},$$

то

$$k' \sim f'k'^s \frac{n}{V'} \sim l^{2+s} k'^{3+s} n. \tag{10}$$

Наконец, из соотношений (8) и (10) получается

$$n \sim (kl)^{(2+s)/(1+s)}, \quad k' \sim \frac{1}{ln^{1/(2+s)}} \sim \frac{1}{l}(kl)^{-1/(1+s)}. \tag{11}$$

Таким образом, из этой безусловно очень грубой оценки следует, что средняя энергия частиц ливня должна убывать с ростом числа частиц медленно, а именно как $n^{-1/(2+s)}$.

Точное экспериментальное исследование этого вопроса можно было бы провести, вероятно, только на ливнях с относительно большим числом частиц, особенно на «толчках» Гофмана.

Обсуждая далее экспериментальные следствия предложенного здесь объяснения ливней, мы сталкиваемся с вопросом, почему в ливнях не наблюдаются чаще тяжелые частицы — протоны и нейтроны; ведь если судить по матричным элементам теории Ферми, то они должны участвовать в образовании ливня наравне с легкими частицами. Ответ на этот вопрос заключается, возможно, в том, что по теории Ферми вероятность испускания группы частиц определяется в значительной степени объемом фазового пространства, доступным испущенным частицам. При заданной общей энергии появление тяжелой частицы всегда приводит к значительному сокращению фазового объема, обусловленному ее большой массой, так что тяжелые частицы могут встречаться, по-видимому, лишь очень редко и только в ливнях с наиболее высокой энергией.

В противоположность этому гипотетические «нейтрино» Паули должны составлять значительную часть проникающего излучения. Ведь при образовании всякого ливня должны возникать нейтрино со средней энергией $\hbar c f'^{-1/(2+s)}$, и эти нейтрино, в свою очередь, могли бы снова образовывать меньшие вторичные ливни. При этом эффективное сечение образования этих вторичных ливней из нейтрино было бы, вероятно, также не намного ниже 10^{-26} см^2. В отличие от нейтрино β-распада, обладающих низкой энергией, нейтрино высотного излучения с их высокой энергией должны были бы непременно проявлять себя своими действиями. Возможно, некоторая часть неионизирующего, но образующего ливни излучения состоит из нейтрино. Однако, исходя из развитых здесь представлений, нельзя исключать и того, что в высотном излучении участвуют световые кванты (фотоны).

Резюмируя теоретический результат предложенного здесь объяснения образования ливней, можно констатировать следующее: тот факт, что процессы столкновений с участием частиц очень высокой энергии протекают совершенно иначе, чем с участием частиц низкой энергии, и что переход от первого процесса ко второму происходит при энергии, значительно превосходящей энергию покоя электронов, указывает на то, что нелинейные члены взаимодействия в волновом уравнении определяют фундаментальную длину, а тем самым и фундаментальную энергию. Впрочем, в этом отношении теория β-распада Ферми и теория излучения Борна[5] оказываются близкими между собой. И в этой и в другой теории имеется фундаментальная длина; соответственно этому теория Борна также привела бы

[5] *Born M.* Proc. Roy. Soc. London, 1933, **A 143**, 410; *Born M., Infeld L.* Proc. Roy. Soc. London, 1934, **A 144**, 425; 1934, **A 147**, 522; 1935, **A 150**, 141.

к результату, что при столкновении двух фотонов очень высокой энергии возникает ливень длинноволновых фотонов[6]. Таким образом, исходя из того, что в этом случае взаимодействие приводит к необходимости введения в теорию материи фундаментальной длины, мы должны поставить вопрос об отношении этого взаимодействия к другим случаям, в которых в теории возникает универсальная длина, например, связанная с массой покоя. Здесь представляется естественной идея Борна о том, что в будущей теории масса покоя может быть в известной степени получена как вторичное следствие взаимодействия, т. е. что массу покоя следует понимать как собственную энергию материальных частиц, обусловленную взаимодействием (и притом, в соответствии с допущениями этой работы, хотя бы в заметной степени взаимодействием, ответственным за β-распад). В пользу такого понимания, во всяком случае, говорит то обстоятельство, что в области высоких энергий ($v \sim c$), имеющей решающее значение для принципиальных вопросов, масса покоя оказывает лишь очень слабое влияние на свойства материи, в то время как взаимодействие Ферми приобретает там определенную роль.

В связи с этим следует указать на то, что применение квантовой теории к системе с бесконечно большим числом степеней свободы, т. е. к континууму, до сих пор всегда приводило к принципиальным трудностям. В теории интегралы по пространству импульсов, выражающие плотность заряда и т. п., обычно всегда расходятся при больших импульсах. Представляется естественным думать, что эта трудность может быть устранена только в том случае, если в теорию вводится некая фундаментальная длина, которая соответствующим ей импульсом определяет границу, где ранее расходившиеся интегралы становятся сходящимися благодаря видоизменению физических законов. Теория Ферми дает надежду на удовлетворение наших желаний потому, что именно при высоких энергиях частиц она приводит к совершенно другим законам, чем прежние теории. Подобно тому, как применение классической статистики к излучению в полости, обладающему бесконечно большим числом степеней свободы, приобрело физический смысл только после введения универсального кванта действия ($\hbar$), применение квантовой теории к непрерывной системе станет, вероятно, возможным только в том случае, если в системе будет определена некая универсальная длина. Прибегая к этому сравнению, мы имеем в виду, конечно, предположение о том, что введение универсальной длины, возможно, вызовет новое принципиальное изменение формального аппарата, по аналогии с тем, например, что введение константы c привело к видоизменению дорелятивистской физики. Но даже если это произойдет, то приближение к новым законам будет возможным только на пути исследования количественных следствий из универсальной длины, например, таких, какие получаются из взаимодействия Ферми; при этом не исключено, что при некоторых условиях придется временно отказаться от последовательного применения квантовой теории. Конечно, на пути продвижения в эту область — совершенно отвлекаясь от физических усложнений — стоят также значительные математические трудности, ввиду очень большой сложности изучения свойств нелинейных уравнений в частных производных. Поэтому задача этой статьи состоит прежде всего в том, чтобы подчеркнуть большое значение, которое следует придавать появлению универсальной длины в теории β-распада Ферми.

(*Поступила 8 июня 1936 г.*)

---

[6] Однако по указанным в начале статьи причинам это не имело бы места в электродинамике, которая в некотором определенном приближении получается из теории позитронов Дирака (см. *Heisenberg W., Euler H.* Zs. Phys., 1936, **98**, 714).

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОБЪЯСНЕНИЯ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ*

Совместно с Х. Эйлером

I. Обзор свойств отдельных частиц
§ 1. Магнитное отклонение и измерение импульса
§ 2. Ионизация и измерение скорости
§ 3. Тормозное излучение и масса покоя
§ 4. Легкие и тяжелые электроны
§ 5. Масса тяжелых электронов
II. Теория легких частиц
§ 6. Обзор электромагнитных процессов
§ 7. Тормозное излучение
§ 8. Образование пар
§ 9. Ионизация
§ 10. Каскадные ливни
§ 11. Математические дополнения к § 10
α) Средняя величина каскадного ливня
β) Флюктуация величины ливня
γ) Частота каскадных ливней
§ 12. Ионизационные ливни Баба
III. Теория тяжелых частиц
§ 13. Тяжелые электроны и ядерные силы
§ 14. Распад тяжелых электронов
§ 15. Вторичные процессы, обусловленные тяжелыми электронами
§ 16. Вторичные процессы, обусловленные быстрыми протонами и нейтронами
IV. Обсуждение спектров и их поглощения
§ 17. Основные эмпирические факты
§ 18. Качественное теоретическое обсуждение
§ 19. Каскадный спектр мягкого излучения в верхней атмосфере. Широтный эффект
§ 20. Проникающие частицы
§ 21. Вторичные электроны от проникающих частиц
V. Обсуждение вторичных явлений
§ 22. Обзор
§ 23. Малые ливни
§ 24. Большие ливни
§ 25. Ядерные процессы

Запутанные явления, обязанные своим происхождением космическим лучам, в последние годы были систематизированы и прояснены в такой степени, что теперь представляется возможным, основываясь на известной нам теории, нарисовать

* Theoretische Gesichtspunkte zur Deutung der kosmischen Strahlung. (Mit *H. Euler*). — Ergebn. der exakten Naturwiss., 1938, **17**, 1–69. *Перевод А. А. Сазыкина.*

в общих чертах взаимосвязанную, хотя еще и не во всех деталях правильную их картину. Возможность этого обеспечивается такими важнейшими достижениями, как понимание того, что квантовая теория в значительной мере правильно описывает свойства высокоэнергичных электронов и световых квантов вплоть до самых высоких доступных нам энергий, а также связанное с этим пониманием открытие новой элементарной частицы, ответственной за проникающую компоненту высотного излучения и обладающей массой, промежуточной между массами электрона и протона. В последнее время эта элементарная частица была найдена прямо на отдельных снимках в камере Вильсона. Мы начинаем наше сообщение с краткого обзора результатов, которые можно извлечь из снимков отдельной ионизированной частицы в камере Вильсона при воздействии магнитного поля (I). Вслед за этим мы излагаем результаты существующей теории о свойствах частиц и вторичных эффектах, обусловленных легкими (II) и тяжелыми (III) частицами. Теоретические результаты затем детально сравниваются с экспериментальными, а именно, сначала рассматриваются спектры отдельных видов частиц и их превращения в атмосфере, потом их вторичные воздействия (ливни, столкновения, ядерные превращения) (V). В нашем сообщении мы не стремились к сколько-нибудь полному обсуждению экспериментальных результатов; от этого можно было бы отказаться тем легче, что недавно появился подробный обзор Мильникеля[1)] по высотному излучению, содержащий основательное изложение обширного экспериментального материала, полученного к настоящему времени.

I
ОБЗОР СВОЙСТВ ОТДЕЛЬНЫХ ЧАСТИЦ

§ 1
Магнитное отклонение и измерение импульса

На рис. 1 приведен полученный в камере Вильсона снимок траектории частицы в магнитном поле. На этом снимке можно прежде всего измерить кривизну траектории. Тем самым производится измерение импульса частицы p, который связан с радиусом кривизны ρ в магнитном поле H известным соотношением (e — заряд частицы, c — скорость света).

$$pc = eH\rho. \tag{1}$$

«Магнитную жесткость» pc/e (и тем самым импульс p) принято измерять в единицах Гс · см или в вольтах (В). Между этими двумя единицами существует соотношение

$$\frac{pc}{eH\rho} = 1\ \frac{\text{эрг}}{\text{э.ед.зар.} \cdot \text{Гс} \cdot \text{см}} = 300\ \frac{\text{В}}{\text{Гс} \cdot \text{см}}, \tag{1'}$$

Для частиц, кинетическая энергия которых $E = \sqrt{(mc^2)^2 + (pc)^2}$ велика по сравнению с их энергией покоя mc^2, произведение pc приблизительно равно энергии, и потому в литературе оно указывается большей частью в электрон-вольтах (эВ). В частности, для электронов высокой энергии в высотном излучении pc практически всегда можно приравнивать энергии; однако для частиц с большей ионизирующей способностью pc уже не будет равно энергии.

[1)] *Miehlnickel E.* Höhenstrahlung. Dresden u. Leipzig: Theodor Steinkopff, 1938.

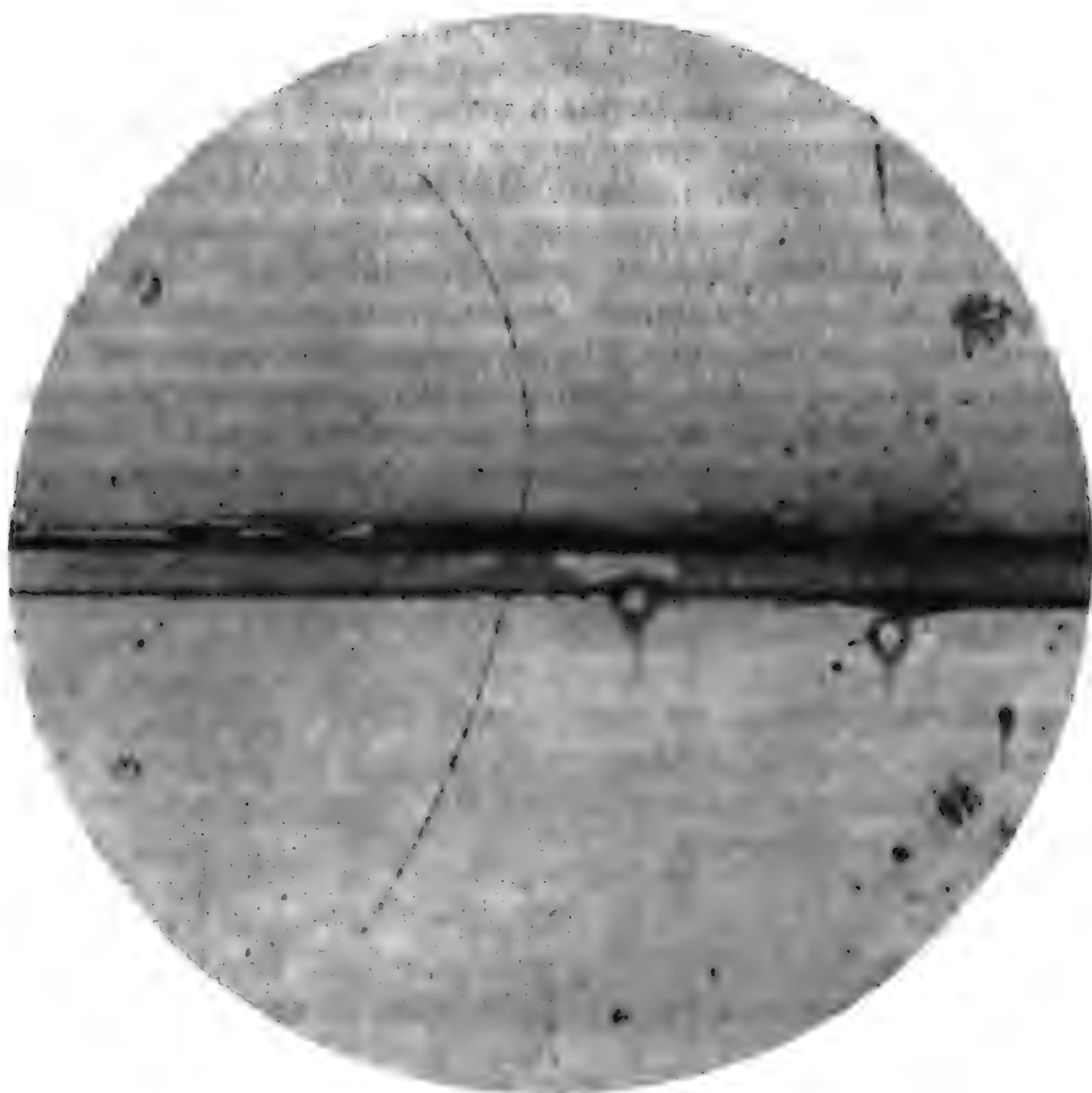


Рис. 1. Снимок Андерсона в камере Вильсона. Позитрон с энергией $6{,}3 \cdot 10^7$ эВ проходит снизу через пластину из свинца толщиной 6 мм и выходит с энергией $2{,}3 \cdot 10^7$ эВ

§ 2

Ионизация и измерение скорости [2]

На снимке, изображенном на рис. 1, можно также подсчитать плотность капель в следе и тем самым измерить потери энергии, испытываемые наблюдаемой частицей при ионизации молекул в воздухе.

Ионизационные потери на 1 см $\left.\frac{\partial E}{\partial x}\right|_J$ по существу служат мерой скорости частицы $V = \beta c$. Они определяются формулой

$$-\left.\frac{\partial E}{\partial x}\right|_J = \frac{a}{\beta^2}, \tag{2}$$

где величина a, по Бете [3] и Блоху [4] очень слабо зависит от массы и лишь логарифмически растет с энергией частицы. По порядку величина a составляет 10^7 эВ/см для Pb и $2 \cdot 10^6$ эВ/см для воды. Более точно ионизационные потери изображены на рис. 2, на котором представлены рассчитанные по Блоху и Баба [5]

---

[2] См. *Heitler W.* Theory of Radiation. Oxford: Clarendon-Press, 1936.

[3] *Bethe H.* Handbuch der Physik. Bd. 24. S. 1.

[4] *Bloch F.* Zs. Phys., 1933, **81**, 363.

[5] *Bhabha H. J.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **164**, 257.

потери энергии на 1 см воды и свинца в зависимости от импульса частиц, имеющих элементарный заряд, но различные массы. Представленным на рис. 2 массам (m = масса электрона, $100m$, $1840m = M$ = масса протона) соответствуют энергии покоя $mc^2 = 0{,}51 \cdot 10^6$ эВ, $100mc^2 = 0{,}51 \cdot 10^8$ эВ, $Mc^2 = 0{,}9 \cdot 10^9$ эВ.

С помощью формулы (2) и рис. 2 можно ясно различить электроны и протоны при одинаковом импульсе $pc = 2 \cdot 10^8$ эВ по производимой ими ионизации: электрон ($mc^2 = 0{,}5 \cdot 10^6$ эВ) имеет в этом случае почти световую скорость и потому оставляет тонкий след, а протон ($Mc^2 = 10^9$ эВ) при этом же импульсе движется медленнее света и потому след оставляет значительно более толстый. Однако возможность ясно отличать электроны от протонов исчезает при энергиях больше $Mc^2 = 10^9$ эВ, так как тогда обе частицы будут двигаться почти со скоростью света, оставляя одинаково тонкий след, в котором плотность капель определяется в основном зарядом. Подробнее об этом будет сказано в § 9.

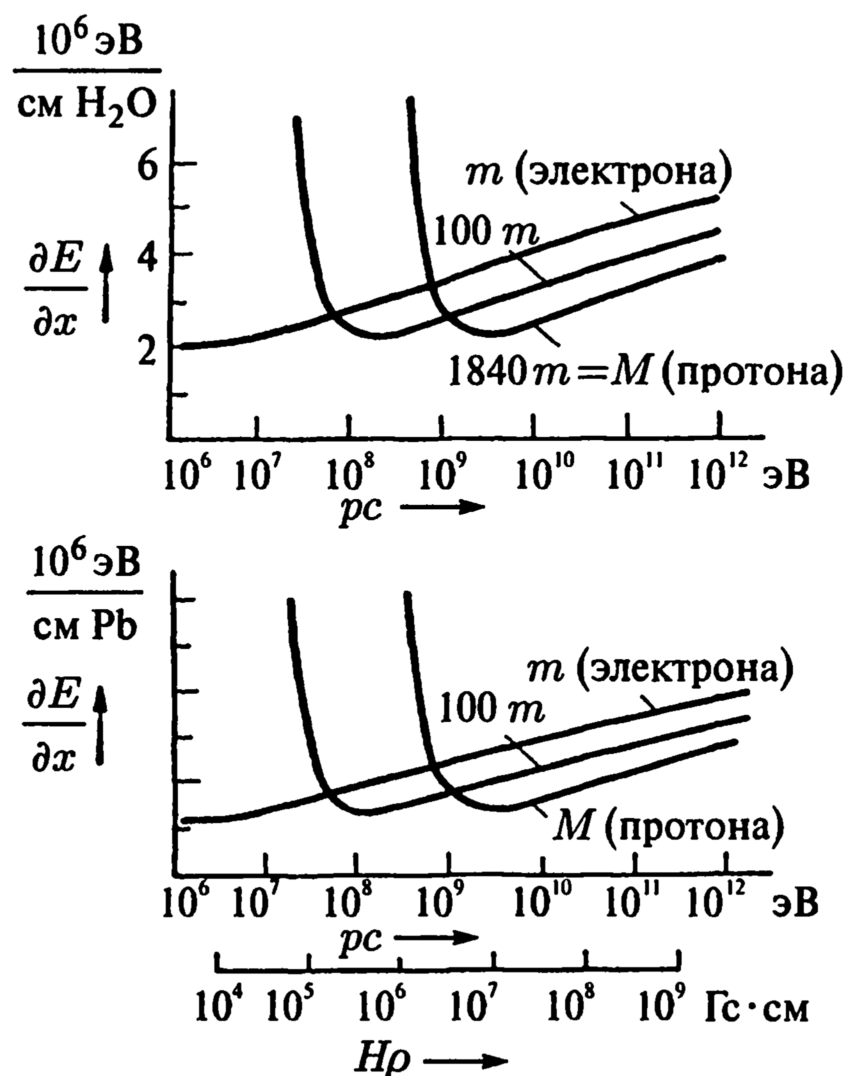


Рис. 2. Ионизационные потери в воде и свинце по формуле Блоха. Абсцисса: импульс частицы в эВ или Гс · см. Ордината: потери энергии в единицах 10^6 эВ/см. Три кривых относятся к частицам различной массы: m (масса электрона), $100\,m$, $1\,840\,m$ (масса протона)

§ 3
Торможение излучением и масса покоя[6]

Наконец, на снимке в камере Вильсона, изображенном на рис. 1, можно определить изменение кривизны траектории в свинцовой пластине. Потеря импульса в свинцовой пластине складывается главным образом из двух частей: ионизационных потерь, которые были рассмотрены в предыдущем параграфе, и радиационных потерь. В то время как ионизация уменьшает энергию частицы, движущейся со световой скоростью, всегда на одну и ту же *абсолютную* величину около 10^7 эВ/см Pb, тормозное излучение отнимает у такой частицы всегда одну и ту же *долю* ее энергии, обратно пропорциональную квадрату ее массы покоя[7]. Электрон с энергией больше 10^7 эВ излучает, например, в 4 мм Pb всегда примерно половину своей энергии, тогда как протон теряет на излучение на этом же отрезке лишь незаметную часть энергии — 0,01 %. Таким образом, радиационные потери энергии электрона в 1 см Pb намного превышают его ионизационные потери, если только энергия электрона больше 10^7 эВ. Более детально тормозное излучение рассматривается в § 7.

§ 4
Легкие и тяжелые электроны

Мы переходим теперь к изложению результатов изучения полученных до сих пор снимков отдельных траекторий.

[6] См. *Heitler W.* Theory of Radiation. Oxford: Clarendon-Press, 1936.

[7] *Bethe H., Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1934, **146**, 83.

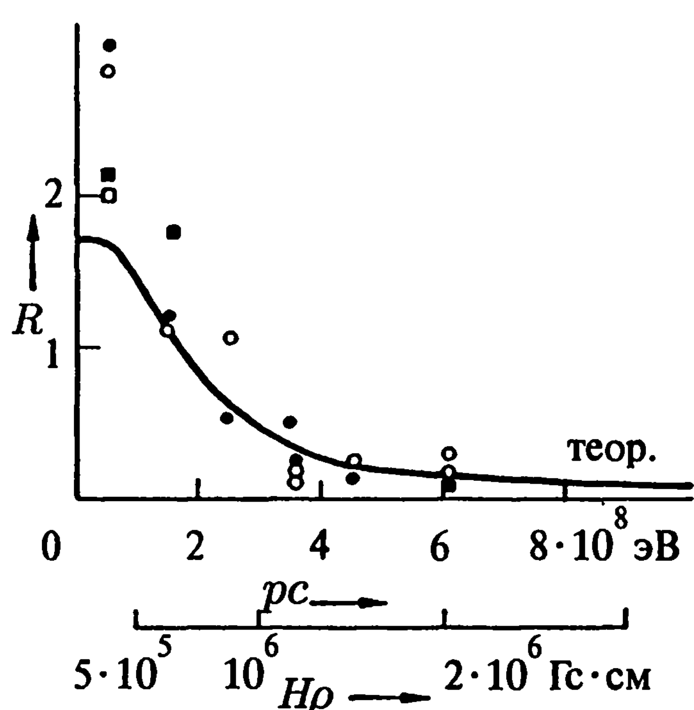


Рис. 3. Тормозные потери как функция импульса. Абсцисса: импульс. Ордината: относительное изменение импульса на 1 см свинца. ○ ● — измерения Блэккета в 1/3 см свинца. □ ■ — измерения Блэккета в 1 см свинца. —— — теоретическая кривая для бесконечно тонкой пластины из свинца (§ 21)

1. Статистика измерений импульса (Кунце[8], Блэккет[9], Герцог и Шеррер[10], Андерсон[11]), которые проводились вплоть до энергии $2 \cdot 10^{10}$эВ, дает спектр ионизирующих частиц, непрерывно спадающий в области высоких импульсов.

2. Следы большинства частиц показывают ионизацию, лишь мало отличающуюся от ионизации, производимой электроном. Только около 1 %[12] всех траекторий образованы более толстыми следами. Это говорит за то, что заряд наблюдаемых частиц не может быть существенно меньше, чем заряд электрона; отсюда делается предположение, что заряд у всех частиц равен электрическому элементарному заряду.

Из того факта, что в области импульсов $pc \leqslant 1/2 \cdot 10^9$ эВ следы оказываются слабыми, делается еще вывод, что почти все частицы с импульсом ниже $1/2 \cdot 10^9$ эВ должны быть легче, чем протоны. Ибо протон с импульсом $pc < 1/2 \cdot 10^9$ эВ должен был бы оставлять заметно более толстый след, чем большинство частиц, найденных в этой области (рис. 2).

3. Потеря импульса в пластине из свинца, измеренная при высоких импульсах Блэккетом и Вильсоном[13], Неддермейером и Андерсоном[14], Крюссаром и Лепринс-Ринге[15], изображена на рис. 3 по измерениям Блэккета. При низких импульсах $pc < 2 \cdot 10^8$ эВ она по величине такая же, как для излучающих электронов (§ 3), а при высоких импульсах уменьшается так, что при $1/2 \cdot 10^9$ эВ составляет лишь около одной десятой доли от начального значения. Отсюда предполагая правильность теории излучения, мы приходим к выводу[16], что частицы с импульсом выше $pc = 2 \cdot 10^8$ эВ в большинстве своем тяжелее, чем электроны.

Из того факта[17], что большая часть частиц, которые наблюдались в области импульсов $2 \cdot 10^8$ эВ $< pc < 1/2 \cdot 10^9$ эВ, ионизирует слабее, чем протон, а излучает слабее, чем электрон, Неддермейер и Андерсон сделали вывод, что здесь дело идет о неизвестном ранее виде «тяжелых электронов» с массой, промежуточной между массами электрона и протона.

---

[8] *Kunze P.* Zs. Phys., 1933, **80**, 559.

[9] *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **159**, 1.

[10] *Herzog G., Scherrer P.* J. Physique et Radium, 1935, **6**, 489; *Herzog G., Scherrer P.* Helvet. Physic. Acta, 1935, **8**, 514.

[11] *Anderson C. D.* Phys. Rev., 1933, **44**, 406.

[12] *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Phys. Rev., 1936, **50**, 263.

[13] *Blackett P. M. S., Wilson J. G.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **160**, 306; *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **165**, 11.

[14] *Neddermeyer S. H., Anderson C. D.* Phys. Rev., 1937, **51**, 884.

[15] *Crussard J., Leprince-Riguet L.* C. R. Acad. Sei. Paris, 1937, **204**, 243; *Crussard J.* J. Physique et Radium, 1937, **5**, 214.

[16] *Neddermeyer S. H., Anderson C. D.* Op. cit.

[17] *Blackett P. M. S., Wilson J. G.* Op. cit.; *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **165**, 11; *Neddermeyer S. H., Anderson C. D.* Op. cit.; *Crussard J., Leprince-Riguet L.* Op. cit.; *Crussard J.* Op. cit.

В противовес такой интерпретации измерений, основанной на гипотезе тяжелых электронов, Блэккет и Вильсон, объясняя свои измерения, сначала предположили, что наблюдаемые частицы суть электроны, которые при импульсах выше нескольких единиц, умноженных на 10^8 эВ, утрачивают свою излучательную способность. Но поскольку справедливость формул излучения, как позднее будет показано при рассмотрении толчков Гофмана (§ 24) и стратосферных измерений (§ 19), подтверждена вплоть до очень высоких энергий порядка 10^{11}эВ и поскольку к тому же несостоятельность теории излучения при выводе формулы торможения (§ 3) теоретически объяснить было бы невозможно, мы должны, пожалуй, считать теперь правильной именно первую интерпретацию.

§ 5
Масса тяжелых электронов

Массу тяжелых электронов можно определить, комбинируя измерения импульса и скорости. Конечно, для этого необходимо наблюдать тяжелый электрон в конце его траектории, чтобы его скорость была значительно меньше скорости света, а его след был существенно толще, чем у электрона. Несмотря на редкость такого события, многим авторам уже удалось получить снимки следов медленных электронов, и мы воспроизводим на рис. 4 один из них, сделанный Вильсоном и Пикапом[19].



Рис. 4. Снимок тяжелого электрона в камере Вильсона, полученный Вильямсом и Пикапом[18]. Здесь *d* — тяжелый электрон с сильным следом, *e* — след легкого электрона для сравнения

Здесь *d* есть след тяжелого электрона, *e* — след электрона с энергией $1/2 \cdot 10^6$ эВ, вмонтированный для сравнения в снимок. Ясно видно, что ионизация частицей *d* примерно втрое сильнее, чем электроном. С другой стороны, кривизна следа *d* показывает, что частица *d* не протон. По кривизне и ионизации можно затем вычислить массу тяжелых электронов, что и было сделано Вильямсом и Пикапом; результаты вычислений приведены в таблице 1.

Таблица 1

Величина: Единицы:	Кривизна 10^5 Гс · см	Ионизация ион 10^6 эВ электр.	Импульс p mc	Скорость c	Масса m	Заряд
След *a*	1,10	5	65	0,30	220 ± 50	−
След *b*	1,83	> 7	107	0,25	430 (< 800)	+
След *c*	1,47	3	85	0,45	190 ± 60	+
След *d*	1,15	3,3	67	0,41	160 ± 30	+

Другие авторы указывают следующие массы покоя μ (в единицах массы электрона):

---

[18] *Williams E. J., Pickup E.* Nature (Lond.), 1938, **141**, 684.

[19] Ibid.

$\mu/m =$ 250 — Корсон и Броде[20],
125 — Броде и Старр[21],
160 — Стрит и Стивенсон[22],
350 — Андерсон и Неддермейер[23],
120 — Рулиг и Крейн[24],
200 — Эренфест[25],
100 — Оже[26],
180–250 — Нишина, Такеучи, Ичимия[27].

Предполагая теперь, что в космических лучах встречаются легкие и тяжелые электроны, мы обсудим сначала теоретически (гл. II, III) следствия, ожидаемые нами при попадании таких частиц в вещество. Позднее (гл. IV, V) мы сравним ожидаемые в целом следствия с опытом, что позволит нам дополнительно определить некоторые параметры, остававшиеся в теории свободными.

II

ТЕОРИЯ ЛЕГКИХ ЧАСТИЦ[28]

§ 6

Обзор электромагнитных процессов

Когда электрон высокой энергии пересекает вещество, он, как уже говорилось, вызывает прежде всего процессы двоякого рода. Во-первых, он сталкивается с электронами атомных оболочек и теряет энергию при *ионизации*. Во-вторых, он отклоняется кулоновскими полями атомных ядер, и это отклонение приводит к *излучению* света, если скорость частицы приближается к скорости света.

Электромагнитные силы превращают часть энергии электрона в излучение, но точно так же они могут вызывать и обратный процесс, т. е. они могут приводить к тому, что световой квант, встречаясь с атомным ядром, будет образовывать электрон-позитронную пару.

Оба эти процесса, тормозное излучение и образование пар, происходят примерно одинаково часто, когда энергия кванта или электрона в достаточной мере превышает энергию покоя электрона $1/2 \cdot 10^6$ эВ.

Для наглядного описания процессов тормозного излучения, образования пар и ионизации мы вместе с Баба и Гайтлером[29] прежде всего введем для каждого материала в качестве единицы длины такой отрезок X_0, на котором электрон теряет из-за тормозного излучения в среднем половину своей энергии. Этот отрезок приводится

---

[20] *Corson D. E., Brode R. B.* Phys. Rev., 1938, **53**, 773.
[21] *Brode R. B., Starr M. A.* Phys. Rev., 1938, **53**, 3.
[22] *Street J. C., Stevenson E. C.* Phys. Rev., 1937, **52**, 1003.
[23] *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Op. cit.
[24] *Ruhlig A. J., Crane H. R.* Phys. Rev., 1938, **53**, 266.
[25] *Ehrenfest P. jr.* C. R. Acad. Sci. Paris, 1938, **206**, 428.
[26] *Auger P.* C. R. Acad. Sci. Paris, 1938, **206**, 346.
[27] *Nishina Y., Takeuchi M., Ishimya T.* Phys. Rev., 1937, **52**, 1198.
[28] См. *Heitler W.* Theory of Radiation. Oxford: Clarendon-Press, 1936.
[29] *Bhabha H. J., Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **159**, 432; *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Phys. Rev., 1937, **51**, 220.

в первой строке таблицы 2[30]; мы будем называть его «радиационной единицей длины» и обозначать толщину слоя, измеренную в этих единицах, через l ($l = X/X_0$). Мы заметим далее вместе с Баба и Гайтлером[31], что в каждом материале существует определенная энергия, а именно такая энергия E_j, при которой ионизационные потери электрона равны его радиационным потерям. Выше энергии E_j преобладают радиационные потери, ниже E_j — ионизационные потери, так как потери энергии на излучение возрастают пропорционально энергии, а потери на ионизацию возрастают с энергией лишь логарифмически, т. е. практически остаются постоянными. Энергия E_j, которая по порядку величины совпадает с ионизационными потерями на радиационной единице длины, указана во второй строке таблицы 2. В дальнейшем энергию E_j мы будем называть также «границей ионизации».

Таблица 2

	Pb	Fe	Al	H_2O	Воздух
X_0 (см) =	0,4	1,4	7,8	34	27 500
$E_j \cdot 10^{-7}$ (эВ) =	1	3	6	15	15

Обратная величина радиационной единицы длины приблизительно пропорциональна квадрату атомного номера z и числу атомов в 1 см^3 ρ/A:

$$X_0 \simeq \text{const}\,\frac{A}{\rho}\,\frac{1}{Z^2}. \tag{3}$$

Обратная величина границы ионизации приблизительно пропорциональна атомному номеру:

$$E_j \simeq \frac{\text{const}}{Z}, \tag{4}$$

потому что ионизационные потери возрастают с числом электронов в атоме Z в первом приближении линейно, а эффективное сечение излучения растет как квадрат атомного номера. Отклонение от закона (4), которое можно заметить в таблице 2, объясняется зависимостью ионизации атома от атомного номера (§ 9; рис. 2).

Кроме названных выше процессов, известную роль играют еще эффект Комптона для световых квантов и спонтанное излучение позитронов[32]. Но поскольку эти процессы становятся заметными лишь при меньших энергиях порядка $< 10^6$ эВ, то мы можем не принимать их во внимание при обсуждении космических лучей, в которых все события разыгрываются в общем при энергиях выше 10^7 эВ.

§ 7
Тормозное излучение

Предположим теперь, что электрон с энергией E проходит через тонкий слой dl и зададим вопрос, какое число световых квантов он излучает в интервале энергий k, $k + dk$.

[30] *Bethe H., Heitler W.* Op. cit.

[31] *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.; *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.

[32] См. *Heitler W.* Theory of Radiation. Oxford: Clarendon-Press, 1936.

В области энергий выше энергии покоя электрона, существенной для космических лучей, это число по Бете и Гайтлеру[33] приблизительно дается формулой

$$J(k)\,dl\,dk = dl\,\frac{dk}{k}\,\ln 2. \tag{5}$$

Отсюда следует, что общее число световых квантов выше некоторой энергии E_1, испущенных на пути dl, равно

$$dn = dl\int\limits_{E_1}^{E} J(k)\,dk = dl\,\ln\frac{E}{E_1}\,\ln 2, \tag{6}$$

а отданная в среднем на пути dl энергия составляет

$$dE = dl\int\limits_{0}^{E} J(k)\,dk = dl\,E\ln 2. \tag{7}$$

Таким образом, относительные потери энергии на излучение dE/E для электронов высокой энергии не зависят от энергии, как мы уже предполагали в § 3. Отсюда следует, что средняя энергия излучающего электрона убывает с толщиной тормозящего слоя экспоненциально:

$$\bar{E}_l = E_0 2^{-l}. \tag{8}$$

(Здесь E_0 — начальная энергия, E_l — энергия после прохождения слоя толщиной l; $l = X/X_0$.) При обсуждении экспериментов необходимо, конечно, учитывать еще флюктуации около этого среднего значения. Указанные флюктуации описываются с помощью вероятности, с которой электрон с начальной энергией E_0 будет иметь энергию в интервале E_l, $E_l + dE_l$ после того, как он пройдет путь l.

По Бете и Гайтлеру[34] эта вероятность дается формулой

$$W(E_l)\,dE_l = \frac{dE_l}{E_0}\left(\ln\frac{E_0}{E_l}\right)^{l-1}\frac{1}{(l-1)!}. \tag{9}$$

В частности, в слое толщиной $l = 1$ равновероятна всякая убыль энергии в интервале от потери всей энергии до нулевой потери.

Полученные из квантовой теории излучения формулы (8) и (9) для средних потерь энергии электрона и для флюктуаций этих потерь около среднего значения подтверждаются измерениями в камере Вильсона до энергии $2\cdot 10^8$ эВ.

Таблица 3 воспроизводит средние потери энергии в пластине из свинца толщиной 0,35 см, полученные в измерениях Андерсона и Неддермейера[35].

На рис. 5 показаны флюктуации потерь энергии в области энергий $E < 2\cdot 10^8$ эВ по измерениям Блэккета[36]. На этом рисунке по оси абсцисс отложены

[33] *Bethe H., Heitler W.* Op. cit.; *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.

[34] *Bethe H., Heitler W.* Op. cit.

[35] *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Op. cit.

[36] *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **165**, 11.

Таблица 3

Средние потери энергии электронов в Pb по Андерсону и Неддермейеру[37)]

	7 900 Гс, 0,35 см — пластина Pb (Пик Пайка)				
Интервал энергий	< 50	50–100	100–150	150–200	$\times 10^6$ эВ
Число следов	29	65	18	13	
Средняя начальная энергия	31	75	123	177	$\times 10^6$ эВ
Средние потери энергии					
экспериментальные	42	82	178	191	$\times 10^6$ эВ/см Pb
теоретические	50	110	175	240	$\times 10^6$ эВ/см Pb
	4 500 Гс, 0,35 см — пластина Pb (Пасадена)				
Интервал энергий	< 50	500–100	100–150	150–200	10^6 эВ
Число следов	22	28	15	16	
Средняя начальная энергия	26	71	117	170	10^6 эВ
Средние потери энергии					
экспериментальные	37	84	124	207	10^6 эВ/см Pb
теоретические	43	105	167	240	10^6 эВ/см Pb

относительные потери энергии R на 1 см Pb, которые получаются после вычитания небольших ионизационных потерь aX из общих потерь энергии электронами:

$$R = \frac{E_0 - E_l - aX}{\frac{E_0+E_l}{2} X}.$$

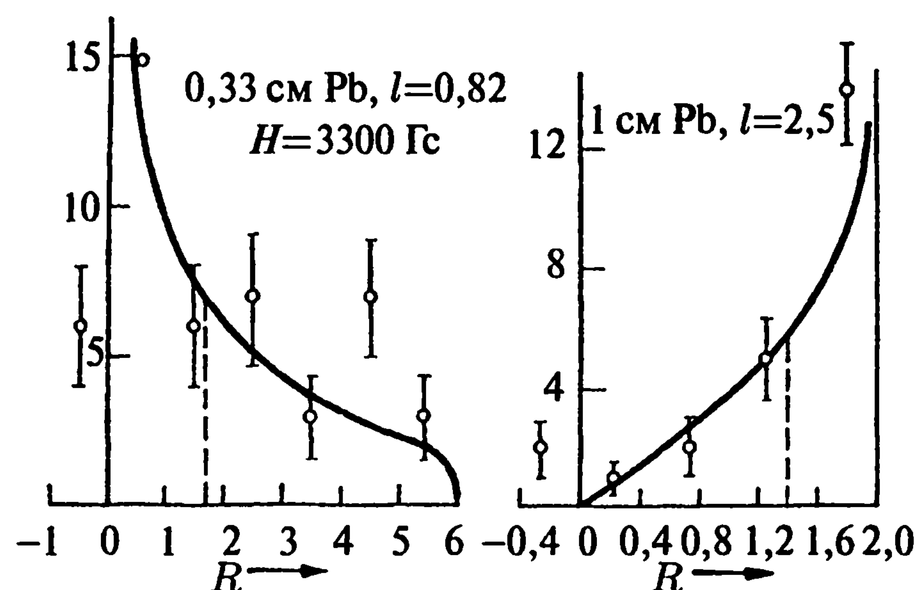


Рис. 5. Флюктуации радиационных потерь при энергиях $E < 2\cdot 10^8$ эВ по Блэккету[38)]. Абсцисса: относительные радиационные потери на 1 см свинца. Ордината: частота радиационных потерь на Pb в пластине толщиной 1/3 см (слева) и 1 см (справа). ⊥ — измерения Блэккета. —— — теория Бете—Гайтлера

Левая часть рис. 5 показывает частоту потери энергии R для тонкой пластины в 1/3 см Pb, толщина которой несколько меньше радиационной единицы длины, так как большие потери энергии в ней оказываются особенно редкими. На правой части рисунка показано распределение для пластины толщиной в несколько радиационных единиц (X = 1 см Pb, $l = 2{,}5$), и большие потери энергии встречаются в ней особенно часто. Сплошные кривые изображают теоретическое распределение (9), среднее значение которого (8) указывается вертикальными пунктирными линиями. Те измеренные точки, которые соответствуют отрицательной потере импульса, имеют в своей основе ошибки при измерениях кривизны и дают приблизительную меру неточности измерения импульса. Если мы будем считать эти траектории примером малых положительных потерь энергии, то получим отчетливый максимум при малых потерях энергии, который не может быть объяснен тормозным излучением и должен, очевидно, приписываться проникающим частицам.

---

37) *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Op. cit.

38) *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **165**, 11.

§8
Образование пар

Вероятность, с которой световой квант рождает пару на пути dl, при высоких энергиях $h\nu \gg mc^2$ не зависит от энергии кванта[39]:

$$\omega \, dl = 0{,}6 \, dl. \tag{10}$$

При меньших энергиях вероятность рождения пар убывает, пока при энергии покоя пары $h\nu = 2mc^2$ не станет равной нулю. Этот закон образования пар, выведенный из теории Дирака, проверен прямыми измерениями только в области γ-излучения Кюри—Жолио, Чадвиком, Блэккетом и Оккиалини[40]. В области высоких энергий мы будем сначала исходить из экстраполяции этого закона (10), а затем проверять получаемые из него следствия.

§9
Ионизация

Ионизацию атомных оболочек можно изучать с помощью следующих явлений.

А. *Потери энергии* можно определить по изменению кривизны траектории в магнитном поле, если скорость электрона настолько мала, что тормозное излучение еще не играет роли. Теория потерь энергии Бете[41] и Блоха[42], результат которой был изображен на рис. 2, была точнейшим образом подтверждена Вильямсом для скоростей меньше 1/4 скорости света[43].

Для *длины пробега* R частицы массой μ и импульсом p, заменяя в формуле (2) величину a приближенно постоянным значением (точным для $p \sim 3{,}5\mu c$), мы получаем:

	Свинец	Вода	Воздух
$a =$	$1{,}2 \cdot 10^7$	$2 \cdot 10^6$	$2{,}5 \cdot 10^3$ эВ/см

$$R(p) = \frac{\mu c^2}{a} \left(\frac{2 + \left(\frac{p}{\mu c}\right)^2}{\sqrt{1 + \left(\frac{p}{\mu c}\right)^2}} - 2 \right) \tag{11}$$

$\frac{p}{\mu c} =$	0	1	2	3	1
$\frac{aR}{\mu c^2} =$	0	0,1	0,7	1,5	−1

---

[39] См. *Heitler W.* Theory of Radiation. Oxford: Clarendon-Press, 1936.

[40] Ibid.

[41] *Bethe H.* Op. cit.

[42] *Bloch F.* Op. cit.

[43] См. *Bethe H.* Op. cit.

Б. *Энергетический спектр* вторичных электронов измерен Ишино[44] в области низких энергий $E < 300$ эВ. Измерения хорошо согласуются с теорией, согласно которой при высоких энергиях первичных и вторичных электронов энергетический спектр вторичных электронов с энергией $> E$ должен иметь приближенный вид const/E[45].

В. *Вторичная ионизация* (s), т.е. число ионов образуемых прямо первичным электроном, может быть экспериментально определена подсчетом ионных скоплений в резких, еще не расплывшихся из-за диффузии, следах в камере Вильсона.

Теоретические число вторичных ионов, которые электрон со скоростью βc образует на 1 см пробега в газе при нормальных условиях, определяется формулой[46]

$$s = \frac{J}{\beta^2}\left(14{,}24 + \ln\frac{\beta^2}{1-\beta^2} - \beta^2\right), \qquad (12)$$

	N_2	O_2	H_2
$J =$	1	1,15	0,29

ионов на 1 см при атмосферном давлении и комнатной температуре.

Вторичная ионизация так же, как и потеря энергии при импульсах $p < mc$, должна возрастать обратно пропорционально квадрату скорости, вблизи импульса $3mc$ достигать минимального значения и после этого минимума возрастать логарифмически с импульсом $p = mc\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}$. Постоянную J теоретически удалось надежно определить только для водорода[47]. Используя по Багге[48] постоянные (12), мы получаем для вторичной ионизации электрона в воздухе минимум при скорости $\beta = 0{,}97$, $\frac{p}{mc} = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} = 3{,}5$, $H\rho = 5{,}8 \cdot 10^3$ Гс · см.

Число вторичных электронов на 1 см s в этом минимуме составляет

	Теоретически (12)	Экспериментально
N_2	17	14–18 — Корсон и Броде[49]
O_2	19,5	20 — Вильямс и Теру[50]
H_2	4,8	5 — Вильямс и Теру[51]

Г. Вторичную ионизацию следует отличать от *полной ионизации* i, т.е. числа от пар ионов, образованных на 1 см первичным электроном и его вторичными, третичными и т.д. ионами.

[44] *Ishino M.* Philosophic. Mag., 1916, **32**, 202.
[45] См. *Bethe H.* Op. cit.; *Bagge E.* Ann. Phys., 1937, **30**, 72.
[46] *Bethe H.* Op. cit.; *Bagge E.* Op. cit.
[47] *Bethe H.* Op. cit.
[48] *Bagge E.* Op. cit.
[49] *Corson D. E., Brode R. B.* Op. cit.
[50] *Williams E. J., Terroux F. R.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1930, **126**, 289.
[51] Ibid.

Полная ионизация была теоретически рассчитана Багге[52] в нерелятивистской области, причем получилось приблизительное согласие с измерениями Гербеса[53] и другими. Электрон с энергией $2 \cdot 10^4$ эВ на своем полном пробеге расходует на образование пары ионов в среднем

	N_2	H_2
Теоретически[54]	28,6 эВ	34 эВ
Экспериментально[55]	34 эВ	37 эВ

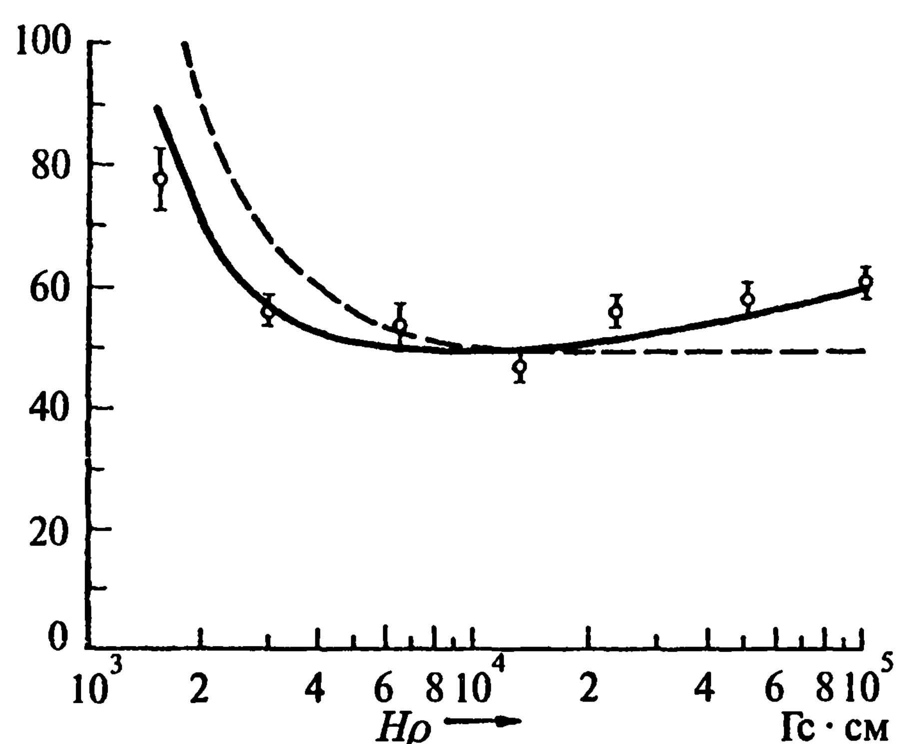


Рис. 6. Удельная ионизация электронов по Корсону и Броде[56]. Абсцисса: импульс электронов $H\rho$ в Гс · см. Ордината: число ионов на 1 см воздуха при нормальных условиях. ♁ — измерения Корсона и Броде. ——— — теоретическая кривая (12) с произвольным постоянным множителем. – – – — приближение для теоретической кривой (2) при $a =$ const

В минимуме ионизации при $\beta \sim 0{,}96$ Корсон и Броде[57], не учитывая неразрешаемые сгущения ионов, нашли в диффузных следах 25 пар ионов на 1 см воздуха, откуда для пределов отношения полной ионизации к вторичной получается значение от $> 1{,}4$ до 1,8.

В измерениях Корсона и Броде[58] впервые было обнаружено предсказанное теорией *логарифмическое возрастание* ионизации с ростом импульса p. На рис. 6 точками показаны результаты измерений Корсона и Броде, тогда как сплошная кривая изображает теоретическую зависимость, полученную при введении в формулу (12) соответственно подобранного постоянного множителя.

Экспериментально логарифмическое возрастание ионизации удалось проследить только до значений $H\rho = 2 \cdot 10^5$ Гс·см, так как частицами, имеющими импульс больше этого значения, оказываются в основном уже тяжелые электроны, для которых минимум ионизации накладывается на подъем ионизации для электронов (рис. 2, 3). Поэтому после открытия тяжелых электронов стало понятно, что прежние попытки обнаружить логарифмический подъем электронной ионизации выше $2 \cdot 10^5$ Гс · см были обречены на неудачу.

Д. Наряду со съемками в камере Вильсона, которые позволяют находить ионизацию в зависимости от импульса, существуют и другие методы измерения ионизации, с помощью которых определяется, правда, лишь *усредненная полная ионизация* на 1 см $\bar{i}$.

[52] *Bagge E.* Op. cit.
[53] *Gerbes W.* Ann. Phys., 1935, **23**, 648.
[54] *Bagge E.* Op. cit.
[55] *Gerbes W.* Op. cit.
[56] *Corson D. E., Brode R. B.* Op. cit.
[57] Ibid.
[58] Ibid.

Штулингер[59], сравнивая число космических частиц в пропорциональном счетчике и ионизацию, получает $\bar{i} = 30 - 35$ пар ионов на 1 см воздуха для проникающих частиц и $\bar{i} = 50$ пар ионов на 1 см воздуха для частиц в ливне. Поскольку ливневые частицы в большинстве представляют собой обыкновенные электроны (§ 43), а проникающие частицы суть тяжелые электроны (§ 17), то повышенное количество ионов в ливне можно рассматривать как подтверждение логарифмического возрастания числа ионов с ростом отношения энергии к массе покоя[60] (рис. 2).

Опорные точки для средней полной ионизации $\bar{i}$ космических лучей можно еще получить, сравнивая ионизационный ток с числом совпадений. Из таких измерений получаются более высокие значения, лежащие между 70 и 135 парами ионов на 1 см воздуха[61]. Однако оценивать измерения этого рода труднее, чем измерения Штулингера, так как мы не можем быть вполне уверены в том, что в одном совпадении не могли регистрироваться несколько космических лучей. Вероятно, этим можно объяснить высокие результаты измерений.

При теоретическом рассмотрении ионизационных потерь в толстых слоях необходимо учитывать, кроме рассмотренной выше ионизации электронных оболочек, еще ядерную ионизацию (§ 16) и диффузию вследствие упругого рассеяния. Ядерная ионизация будет рассмотрена позднее (гл. III); упругое рассеяние изучалось теоретически Вильямсом[62] и экспериментально Блэккетом и Вильсоном[63]; оно может увеличивать эффективное поглощение при прохождении через более толстые слои при меньших импульсах налетающих частиц[64]. Однако при высоких энергиях оно играет лишь незначительную роль.

§ 10

Каскадные ливни

В основе процессов тормозного излучения и образования пар по принципу соответствия лежат электромагнитные силы. Согласно квантовой теории электромагнитных полей эти процессы являются в общем простыми, т. е. световой квант большей частью образует на одном ядре только одну пару, а электрон излучает на отдельном ядре только один световой квант. В соответствии с теорией излучения вероятность процессов более высоких порядков, когда на отдельном ядре возникают несколько пар или несколько световых квантов, должна быть пропорциональна постоянной тонкой структуры Зоммерфельда $\frac{\varepsilon^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$, возведенной в степень с показателем, равным рассматриваемому порядку, и с ростом энергии налетающей частицы E она будет возрастать лишь логарифмически[65].

Несмотря на простой характер электромагнитных взаимодействий, процессы тормозного излучения и образования пар в конечном слое вещества все же могут приводить, ввиду большой их частоты, к возникновению нескольких

[59] *Stuhlinger E.* Zs. Phys., 1938, **108**, 444.
[60] *Stuhlinger E.* Op. cit.
[61] *Miehlnickel E.* Op. cit.; *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.
[62] *Williams E. J.* Züricher Vorträge. Berlin: Julius Springer, 1936.
[63] *Blackett P. M. S., Wilson J. G.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **165**, 209.
[64] *Heisenberg W.* Ann. Phys., 1932, **13**, 430.
[65] *Kockel B.* Zs. Phys., 1937, **107**, 153.

вторичных лучей из одного первичного луча, как почти одновременно показали Карлсон—Оппенгеймер[66] и Баба—Гайтлер[67].

Ведь если электрон высокой энергии падает на слой свинца, то на первых 4 мм своего пробега он образует один квант света с энергией того же порядка. Этот световой квант еще через несколько миллиметров образует пару. Электрон и позитрон будут опять излучать новые световые кванты, и из слоя свинца выйдет целый рой электронов, позитронов и световых квантов. Таким образом, процессы тормозного излучения и образования пар благодаря «умножению» ведут к формированию «каскадного» ливня. В качестве предшественницы «каскадной теории» можно рассматривать указанную в 1935 г. Гейгером и Фюнфером лучевую схему[68], которая была задумана для упорядочения ливневых явлений. Карлсон и Оппенгеймер, Баба и Гайтлер вычислили статистически по формулам § 7 и 8 величину и энергетический спектр каскадного ливня, т. е. число электронов и позитронов z с энергией выше некоторого значения E_1, которое создает электрон с начальной энергией E после прохождения расстояния l:

$$z = z(l, E, E_1).$$

(Под «электронами» мы будем понимать в дальнейшем всегда электроны с положительным и отрицательным зарядом.)

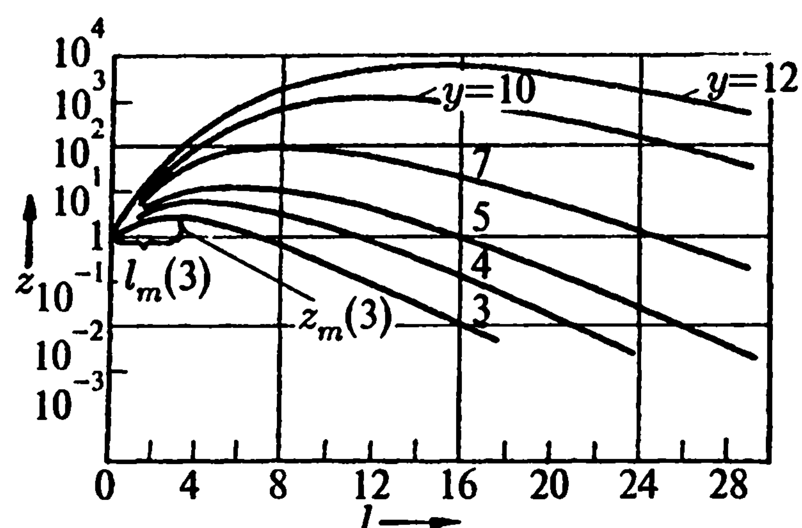


Рис. 7. Увеличение числа электронов. Абсцисса: толщина l слоя материала в единицах таблицы 2. Ордината: число $z(l, y)$ электронов и позитронов, создаваемых одним электроном e^j с энергией E_j в области энергий $> E_j$ под слоем толщиной l

Результат показан на рис. 7. По оси абсцисс отложена толщина слоя l, по оси ординат нанесено число частиц z. Параметр y, отличающий отдельные кривые, означает логарифм отношения начальной энергии к конечной

$$y = \ln \frac{E}{E_1}.$$

Легко видеть, что число частиц зависит только от этого отношения, если пренебречь влиянием ионизации для $E_1 \gg E_j$:

$$z = z(l, y). \tag{13}$$

Ведь при высоких энергиях относительное распределение энергии по формулам (7) и (10) не зависит от самой энергии.

«Функция умножения» $z = z(l, y)$, представленная на рис. 7, содержит прежде всего информацию двух видов. Во-первых, она дает среднюю *величину ливня*, создаваемого частицей с энергией E под слоем толщиной l; эту величину ливня мы получаем из функции $z(l, y)$, приравнивая конечную энергию E_1 границе ионизации E_j для соответствующего материала (таблица 2).

$$y = \ln \frac{E}{E_j}:$$

---

[66] *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.

[67] *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.; см. также *Landau L., Rumer G.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 213.

[68] *Geiger H., Fünfer E.* Zs. Phys., 1935, **93**, 543; *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.

$y =$	3	4	5	7	10	12
Pb … E =	$2 \cdot 10^8$	$5{,}5 \cdot 10^8$	$1{,}5 \cdot 10^9$	$1{,}1 \cdot 10^{10}$	$2{,}2 \cdot 10^{11}$	$1{,}6 \cdot 10^{12}$ эВ
Fe … E =	$6 \cdot 10^8$	$1{,}6 \cdot 10^9$	$4{,}5 \cdot 10^9$	$3{,}4 \cdot 10^{10}$	$6{,}7 \cdot 10^{11}$	$4{,}8 \cdot 10^{12}$ эВ
H_2O, Воздух } E =	$3 \cdot 10^9$	$8{,}2 \cdot 10^9$	$2{,}2 \cdot 10^{10}$	$1{,}7 \cdot 10^{11}$	$3{,}3 \cdot 10^{12}$	$2{,}4 \cdot 10^{13}$ эВ

(14)

Это означает, что мы приближенно учтем влияние ионизации, положив, что ниже границы ионизации E_j электрон мгновенно останавливается из-за потери энергии на ионизацию, но что выше границы ионизации E_j электрон не участвует в ионизации. При более точном вычислении величины ливня мы должны прибавить к указанному числу электронов $> E_j$ еще число электронов $< E_j$, затабулированное в работе Арли[69]; для $y = \ln \frac{E}{E_j} = 4$, например, этот расчет имеет вид[70]:

При $l =$	1	2	3	5	10
$z(> E_j) = z(l,4) =$	1,84	3,35	4,66	5,17	1,11
$z(< E_j) =$	0,09	0,66	1,75	4,39	3,00

(14а)

Вид зависимости средней величины ливня $z(l, y)$ от толщины слоя, изображенный на рис. 7, с учетом данных (14) качественно вполне объясним. При тонких слоях средняя величина ливня возрастает с толщиной, так как начальная энергия может раздробиться на тем большее число частей, чем больше атомных ядер вступит во взаимодействие. Однако при более толстых слоях становятся заметными потери энергии на ионизацию, которые затормаживают все частицы, энергия которых из-за радиационного торможения упала ниже границы ионизации E_j. Эти потери энергии сначала уравновешиваются размножением частиц при максимуме l_m, но затем они приводят к спаду кривой $z(l)$. Равновесие наступает, например, для электрона с энергией 10^{11} эВ в слое 5 см Pb ($l_m = 12$), в котором образуется ливень из 1 000 частиц. Под еще большими слоями преобладает поглощение начальной энергии 10^{11} эВ, так что при 10 см Pb величина ливня уменьшается в 10 раз.

Во-вторых, рис. 2 дает нам информацию о *спектре*, который образуют различные лучи в каскадном ливне. Форма этого вторичного спектра, создаваемого одним отдельным электроном, получается из функции $z(l, y)$, если считать постоянными толщину слоя и начальную энергию, но варьировать конечную энергию E_1 в выражении $y = \ln \frac{E}{E_1}$. Более подробное рассмотрение в следующих параграфах тогда покажет, что число частиц выше некоторой энергии E_1 в ливне спадает приблизительно как const/E_1^a ($1 < a < 2$, (19), (19а), (15)), если ливень образуется в толстых слоях или в «равновесном слое» l_m.

Если вместо ливнеобразующего электрона появится световой квант, то возникают в основном такие же линии, так как световой квант на первых же миллиметрах пробега в свинце образует пару, которая затем, со своей стороны, будет создавать указанные выше ливни. По той же причине число световых квантов, образующихся в ливне, будет по порядку величины таким же, как число электронов и позитронов.

---

[69] *Arley N.* Proc. Roy. Soc. Lond. Im Erscheinen; см. также *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.
[70] *Arley N.* Op. cit.

§ 11
Математические дополнения к § 10

α) *Средняя величина каскадного ливня.* Теперь мы обсудим несколько подробнее математические свойства функции умножения, изображенной на рис. 7, которая определяет среднюю величину z ливня с начальной энергией E на расстоянии l.

а) *Максимальная величина ливня* z_m (т. е. максимум кривой на рис. 7) приблизительно пропорциональна начальной энергии ливнеобразующего электрона E[71]:

$$z_m = z(l_m, y) \simeq \frac{1}{8}\left(\frac{E}{E_j}\right)^{0,93} \quad \left(\frac{\partial z}{\partial l} = 0\right). \tag{15}$$

Эта формула утверждает, что в максимуме энергия электрона дробится на части со средней энергией порядка E_j.

б) Толщина *равновесного слоя* l_m, при которой наступает максимум на рис. 7, растет с начальной энергией E логарифмически

$$l_m \simeq 1{,}2y \simeq 3\lg z_m + 2{,}7 \quad \left(\frac{\partial z}{\partial l} = 0\right). \tag{16}$$

Это становится понятным, если мы вместе с Карлсоном и Оппенгеймером заменим для наглядности истинный процесс образования ливня в равновесном слое l_m модельным процессом, в котором каждый раз на пути $l = 1$ происходит удвоение числа ионизирующих лучей путем деления. Мы получим тогда на толщине l_m величину ливня $z_m \sim 2^{l_m}$, т. е. логарифмическую зависимость толщины равновесного слоя l_m от числа частиц z_m или от начальной энергии E.

в) *Ширина* максимумов на кривых рис. 7 зависит от энергии очень слабо. Это яснее всего выражается соотношением, которым в дальнейшем мы будем пользоваться чаще:

$$\int_0^\infty dl\, z(l, y) \approx \frac{3}{4}\frac{E}{E_j}. \tag{17}$$

г) При вычислении величины ливня под *тонкими слоями* и для высокой начальной энергии влиянием потерь энергии можно пренебрегать. Мы получим тогда

$$z(l, y) \simeq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^h}{n!(2n)!} \quad (l \lesssim 2,\ y \gg 1), \qquad x = 0{,}83y\, l^2. \tag{18}$$

Отдельные члены этого ряда дают вклад отдельных «поколений», которые приводят к последовательному умножению числа частиц. Сумма (18) для больших значений произведения x приближенно может быть заменена на

$$z(x) \simeq 0{,}20e^{1{,}89\sqrt[3]{x}}x^{-1/6} \quad (x \gtrsim 1). \tag{18a}$$

Величина ливня под тонкими слоями, таким образом, возрастает с начальной энергией лишь логарифмически при низких энергиях, но при более высоких энергиях или под более толстыми слоями она начинает расти с энергией все сильнее и сильнее, переходя в конце концов в линейную функцию энергии (14).

---

[71] *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.

д) Для *толстых слоев*, под которыми преобладает поглощение, величина ливня z спадает с толщиной слоя l экспоненциально и возрастает с начальной энергией E по степенному закону

$$z(l, y) \simeq e^{ay-bl-3,2}. \tag{19}$$

При этом величины a и b медленно изменяются в зависимости от y и l [72]:

вблизи	$l = 9$	15	21	30	(19a)
	$y = 3$	5	7	10	
имеем	$a = 2,14$	2,00	1,79	1,44	
	$b = 0,48$	0,44	0,37	0,25	

Более точные таблицы функции (13) имеются в работах Карлсона—Оппенгеймера [73], Баба—Гайтлера [74] и Арли [75].

β) *Флюктуации величины ливня.* Полученные выше формулы для средней величины ливня в общем случае еще нельзя прямо сравнивать с опытом по двум причинам. Во-первых, энергия ливнеобразующего электрона бывает известна только в редчайших случаях, и наблюдаются лишь средние значения, создаваемые непрерывным спектром ливнеобразующих электронов. Поэтому полученные выше формулы мы должны еще усреднить по спектру электронов (в § 11γ). Во-вторых, кроме средней величины ливня можно наблюдать частоту определенных ливней, для расчета которой мы должны знать флюктуации величины ливня.

Итак, мы исходим теперь из того, что известна величина ливня $\bar{N}$, образованного электроном с энергией $E = E_j e^y$ под слоем толщиной l (§ 11α):

$$\bar{N} = z(l, y),$$

и задаем вопрос о флюктуации величины ливня ΔN около ее среднего значения $\bar{N}$

$$\Delta N = \left(\overline{N^2} - \bar{N}^2\right)^{1/2}.$$

Эта флюктуация была впервые оценена Баба и Гайтлером [76] в предположении, что отдельные лучи ливня можно рассматривать как независимые события.

Соответственно, они получили формулу Пуассона

$$\frac{\Delta N}{\bar{N}} = \frac{1}{\sqrt{\bar{N}}}. \tag{20}$$

После этого Ферри [77] связал между собой процессы, происходящие при образовании ливня, с помощью модели, согласно которой каждая ионизирующая частица с некоторой вероятностью, отнесенной к толщине слоя, превращается в две частицы, и в результате получил значительно большую флюктуацию

$$\frac{\Delta N}{\bar{N}} = 1. \tag{21}$$

---

[72] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

[73] *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.

[74] *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.

[75] *Arley N.* Op. cit.

[76] *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.

[77] *Furry W. H.* Phys. Rev., 1937, **52**, 569.

Как показывает более подробное исследование[78], в действительности для флюктуации может быть получена формула, которая имеет промежуточный между двумя крайними случаями (20) и (21) характер, а при очень тонких слоях, в максимуме кривой (рис. 7) и при очень толстых слоях ($l \gtrsim 2y$) переходит в формулу Пуассона (20):

$$\left.\begin{aligned} \frac{\Delta N}{\bar N} &\simeq \frac{1}{\sqrt{\bar N}}, && l \lesssim 1, \\ \frac{\Delta N}{\bar N} &\simeq \frac{1}{\sqrt{ly \ln 2}}, && 1 \lesssim l \lesssim \frac{1}{2}y, \end{aligned}\right\} \quad (22а)$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\Delta N}{\bar N} &\simeq \left|\frac{\partial \bar N}{\partial l}\right| \cdot 0{,}92 + \sqrt{\bar N}, && \frac{1}{2}y \lesssim l \lesssim 2y, \\ \frac{\Delta N}{\bar N} &\simeq \frac{1}{\sqrt{\bar N}}, && l \gtrsim 2y. \end{aligned}\right\} \quad (22б)$$

Формула (22а) получается, если учесть, что в области, в которой поглощение еще несущественно ($l \ll y$), флюктуации величины ливня обусловлены главным образом флюктуацией числа световых квантов «первого поколения» ($\frac{\Delta N}{\bar N} \simeq \frac{\Delta n}{\bar n} \simeq \frac{1}{\sqrt{\bar n}} = \frac{1}{\sqrt{ly \ln 2}}$ по формуле (6)). В формуле (22б), которая должна действовать в области более сильного поглощения, существенно используется предположение, что испускание y световых квантов наиболее высокой энергии первичным электроном может происходить иногда несколько раньше, а иногда и несколько позже, так что получается такой же самый результат, как при флюктуации толщины слоя $\Delta l \simeq 0{,}9$[79].

Распределение ливней по величине для больших ливней приближенно следует закону Гаусса. Вероятность того, что электрон с энергией $E = E_j e^y$ в слое толщиной l образует ливень из N частиц, имеет тогда вид

$$W(N, l, y)\, dN = \frac{\exp\left\{-\frac{(N-\bar N)^2}{2(\Delta N)^2}\right\}}{\sqrt{2\pi}\, \Delta N} dN \quad (\bar N = z(l, y)). \tag{23}$$

γ) *Частота каскадных линий.* Теперь мы предположим, что падающие электроны с энергией выше $E = E_j e^y$ имеют спектр[80]

$$F(E) = J_0 \left(\frac{E_0}{E}\right)^\gamma = J_0 \left(\frac{E_0}{E_j}\right)^\gamma e^{-\gamma y}, \tag{24}$$

и спросим, с какой частотой

$$H(N, l)$$

они вызывают в слое толщиной l ливень с числом частиц больше N. Функция $H(N, l)$ называется также *кривой возбуждения ливня* $H(l)$, если при постоянной величине ливня N рассматривается только вариация толщины слоя l, или «*кривой*

[78] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

[79] *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.

[80] Постоянные J_0 и γ, которые означают интенсивность и степень спада спектра, позднее будут найдены эмпирически. Энергия E_0 может быть выбрана произвольно, например, $E_0 = 10^8$ эВ.

распределения ливней» $H(N)$, если при постоянной толщине слоя варьируется только величина ливня N.

Для частоты ливней в общем случае справедлива формула

$$\frac{\partial}{\partial N} H(N,l) = \int_0^\infty dE \frac{\partial F(E)}{\partial E} W\left(N, l, \frac{E}{E_j}\right), \tag{25}$$

в которой первый множитель означает число падающих электронов в интервале энергий E, $E + dE$, а второй множитель дает определяемую формулами для флюктуаций (22) и (23) вероятность, с которой электрон с энергией E вызывает в слое l ливень из N частиц.

Как показывает более детальное рассмотрение формулы (25), флюктуация существенна только при малых ливнях под тонкими слоями. Однако флюктуацией (для нормальных спектров $\gamma < 4$) можно пренебрегать при рассмотрении больших ливней $N > 100$ или больших толщин $l > 3 \lg N$[81]. В этом случае формула (25) упрощается

$$H(N,l) \simeq F(E) = J_0 \left(\frac{E_0}{E_j}\right)^\gamma e^{-\gamma y} \quad (N = z(l,y)). \tag{25a}$$

Формула (25а) показывает, что частота ливней больше чем из N частиц под слоем l равна частоте следования падающих электронов с энергией выше такой величины E, которая в среднем создавала бы ливень N под указанным слоем l.

Частота ливней, получаемая этим методом, представлена на рис. 8 и в последующих формулах. На рис. 8 изображена «кривая возбуждения ливней» (25а) для $N = 200$ частиц, т. е. частота ливней более чем из 200 частиц в зависимости от толщины слоя l (таблица 2) для спектра

$$F(E) = \left(\frac{E_0}{E}\right)^{3/2}. \tag{24a}$$

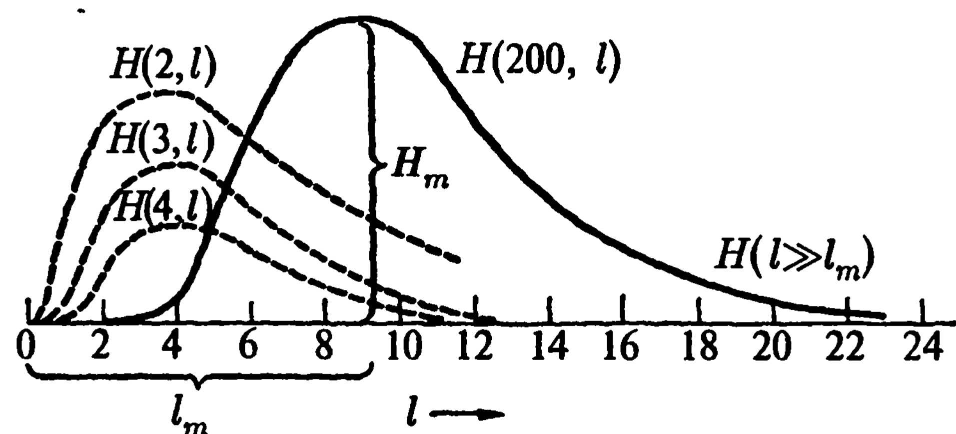


Рис. 8. Кривые возбуждения ливней. Абсцисса: толщина слоя в единицах таблицы 2. Ордината: теоретическая частота $H(N,l)$ ливней более, чем из N частиц. ——— — для больших ливней $N = 200$. — — — — для малых ливней $N = 2, 3, 4$ по Арли. Масштаб по оси ординат для пунктирных кривых отличается от масштаба для сплошной кривой

На рис. 8, кроме того, для меньших ливней, содержащих более чем $N = 2, 3, 4$ частицы, пунктиром показаны соответствующие кривые возбуждения, вычисленные Арли[82] по формуле (20) для флюктуаций малых ливней, но с учетом поправки (14а) для медленных электронов, из спектра

$$F(E) = \left(\frac{E_0}{E}\right)^{3/2} \text{ для } E > E_0 = 2 \cdot 10^8 \text{ эВ}, \quad F(E) = 15\frac{E}{E_0} \text{ для } E < E_0. \tag{26}$$

Однако вычисленные значения почти не зависят от спектра. Частота ливней для спектра (24) имеет следующие общие свойства[83], которые частично можно увидеть из рис. 8.

[81] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

[82] *Arley N.* Op. cit.

[83] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

а) Для *тонких слоев* частота больших ливней круто растет с толщиной слоя. Распределение ливней $H(N)$ при больших ливнях спадает тем быстрее, чем тоньше слой (рис. 25) (18а):

для $1 \lesssim l \lesssim 2$ до 3, $N > 100$ имеем

$$H(N,l) \simeq J_0 \left(\frac{E}{E_j}\right)^{\gamma} \exp\left\{-\frac{0{,}18\gamma}{l^2}\left(\ln N + \frac{1}{2}\ln\ln N + 1{,}5\right)^3\right\}. \qquad (27)$$

б) Частота ливней достигает *максимума* при «равновесном слое» (16)

$$l_m \simeq 3\lg N + 2{,}7, \qquad (28)$$

при котором распределение ливней $H(N)$ приближенно равно распределению $F(E)$ в спектре (15):

$$H(N,l_m) = H_m(N) \simeq J_0 \left(\frac{E_0}{E_j}\right)^{\gamma} \left(\frac{1}{8N}\right)^{\gamma/0{,}93} \qquad (29)$$

в) Для *толстых слоев* возбуждение ливней $H(l)$ в соответствии с формулой (19) убывает снова экспоненциально, так что примерно на удвоенной ширине кривой оно спадает до одной десятой части максимального значения. Распределение ливней $H(N)$ здесь лишь немного круче, чем спектр $F(E)$.

Для $l \gtrsim 5\lg N$ в соответствии с формулой (19) имеем

$$H(N,l) \simeq \left(\frac{1}{N}\right)^{\gamma/a} e^{-(\gamma/a)bl} \left(\frac{E_0}{E_j}\right)^{\gamma} e^{-3{,}2\gamma/a}$$

с коэффициентами (30)

	a	=	1,9	1,5
	b	=	0,40	0,25
для	N	$\simeq$	10	1 000
	l	$\simeq$	15	20

г) Интенсивность ливней, как показывает множитель $\left(\frac{E_0}{E_j}\right)^{\gamma}$ в формулах (27)–(30), в тяжелом материале значительно больше, чем в легком; например, в Pb дробление энергии может происходить до $E_j = 10^7$ эВ, тогда как в Al оно прекращается вследствие ионизации уже на границе $E_j = 6 \cdot 10^7$ эВ (таблица 2). В случае $\gamma = 1$ интенсивности в различных материалах приблизительно пропорциональны атомному номеру. Для сильно спадающих спектров $\gamma > 1$ различия между различными материалами становятся еще заметнее.

В частности, функция $H(1,l)$, полученная из соотношения (25), дает число событий с более чем одной частицей, т. е. число совпадений, которые возбуждаются электронами в установке по рис. 9, в зависимости от толщины слоя.

Вычисляя кривую поглощения совпадений $H(1,l)$ в различных материалах для среднего спектра (24, $\gamma \simeq 1$–2), мы найдем, как показано Гайтлером[84], что для слоев с одинаковой массой получается примерно одинаковая интенсивность. Такая приблизительная пропорциональность поглощения электронных совпадений массе обусловлена компенсацией двух процессов. В тяжелом материале раздробление начальной энергии на 1 г/см^2 больше, чем в легком. Однако в тяжелом материале

[84] *Heitler W.* Nature (Lond.), 1937, **140**, 235; см. также *Arley N.* Op. cit.

оно может продолжаться до более низкой энергии, так что одинаковые массы будут обладать приблизительно одинаковым поглощением, таким, как будто существует одно только ионизационное поглощение.

§ 12

Ионизационные ливни Баба

В соответствии с каскадной теорией каждый электрон, попадающий на слой толщиной больше 1 см Pb, производит ливень. Тяжелые частицы практически не могут прямо вызвать каскадные ливни, так как из-за своей большой массы они почти не излучают. Несмотря на это, как показал Баба[85], на основе каскадной теории следует ожидать, что и тяжелые частицы иногда будут сопровождаться меньшими ливнями.

Ведь тяжелая частица при прохождении через вещество теряет энергию путем ионизации, т. е. она выбирает электрон из пересекаемых ею атомных оболочек (§ 9). При этом электрону иногда передается большая энергия, и такой сильно возбужденный электрон в свою очередь производит каскад.

Среднее число электронов и позитронов с энергией выше характеристической для материала граничной энергии E_j (§ 6), которые сопровождают указанным образом тяжелые электроны с энергией 10^{10} эВ в слое свинца, согласно Баба[86] равно 10 %. Можно полагать, что среднее полное число в соответствии с формулой (14a) будет вдвое больше. Более точные значения указанного среднего числа электронов, рассчитанные Баба для частиц с массой $\mu = 100m$ (m — масса электрона) при различных энергиях представлены в таблице 4[87].

Таблица 4

Среднее число электронов, сопровождающих тяжелый электрон с энергией E (согласно Баба)

E		Число частиц $> E_j$	Полное число частиц
10^8 эВ	Pb	–	–
	H_2O		
10^{10} эВ	Pb	0,09	0,19
	H_2O	0,03	0,07
10^{12} эВ	Pb	0,16	0,34
	H_2O	0,07	0,15

Следующая таблица 5 показывает распределение этого числа электронов по линиям различной величины. Она указывает вероятность $-\frac{\partial}{\partial N}Q(N, E)$, с которой тяжелый электрон с энергией E сопровождается электронным ливнем из N частиц. При этом под N снова понимается число ливневых частиц с энергией выше границы ионизации E_j. Истинная величина ливня по оценкам Баба должна быть вдвое больше.

---

[85] *Bhabha H. J.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **164**, 257.

[86] Ibid.

[87] Ibid.

Таблица 5

Вероятность $-\frac{\partial}{\partial N}Q(N,E)$,
с которой тяжелый электрон с энергией E
сопровождается ливнем из N частиц

E		$N=1$	2	4	5	10	50
10^8 эВ	Pb	–	–	–	–	–	–
	H_2O	–	–	–	–	–	–
10^{10} эВ	Pb	0,046	0,014	0,0057	0,0038	0,0012	$0{,}34\cdot10^{-4}$
	H_2O	0,025	0,007	0,0022	0,0011	0,0003	–
10^{12} эВ	Pb	0,047	0,015	0,0060	0,0042	0,0013	$0{,}54\cdot10^{-4}$
	H_2O	0,028	0,009	0,0036	0,0024	0,0008	$0{,}29\cdot10^{-4}$

Таблицы в грубом приближении можно заменить следующей формулой для вероятности $Q(N,E)$, с которой тяжелый электрон с энергией $E \gg \mu c^2$ сопровождается ионизационным ливнем в воде с числом частиц больше N

$$\begin{aligned} Q(N,E) &\simeq 0{,}03\frac{1}{N} \quad \text{для} \quad E \gg 8NE_j, \\ Q(N,E) &\simeq 0 \quad\quad\;\; \text{для} \quad E \ll 8NE_j. \end{aligned} \tag{31}$$

Эта формула в своих главных чертах понятна. Ведь для того, чтобы возник ливень из N частиц, необходимо (в соответствии с формулой (15)) передать электрону в среднем энергию $8NE_j$, а для этого тяжелый электрон должен обладать энергией, по меньшей мере равной $8NE_j$. Таким образом, ионизационные ливни более чем из N частиц в материале с границей ионизации E_j могут вызываться только тяжелыми электронами с энергией выше $8NE_j$. Закон распределения $\frac{1}{N}$ (31) для ионизационных ливней, состоящих более чем из N частиц, в соответствии с формулой (15) следует из распределения энергии $\frac{1}{E}$ (§ 9B) для ионизационных электронов с энергией выше E.

Среднее число электронов, находящихся в равновесии с тяжелыми электронами с энергией E, в соответствии с формулами (31) приблизительно будет

$$\int_0^{E/8E_j} -\frac{\partial Q(N,E)}{\partial N} N\,dN = 0{,}03\ln\frac{E}{8E_j} \quad (\text{в } H_2O), \tag{32}$$

в грубом согласии с таблицей 4.

Частота ионизационных ливней в других веществах, отличных от воды, получается из формул (31)–(32) умножением их на коэффициент

$$\frac{0{,}8\cdot10^9\ \text{эВ}}{E_j}\,\frac{1}{Z} \tag{33}$$

(Z — атомный номер, E_j — граница ионизации).

III

ТЕОРИЯ ТЯЖЕЛЫХ ЧАСТИЦ

§ 13

Тяжелые электроны и ядерные силы

Во введении (1) были уже разъяснены причины, на основании которых следует полагать, что проникающая компонента высотного излучения состоит главным образом из нового вида элементарных частиц, обладающих массой примерно в 160 раз большей, чем электроны. С одной стороны, в проникающей компоненте мы не можем иметь дело с обыкновенными электронами, так как они в соответствии с теорией и опытом вызывают каскадные ливни и потому не могут проникать через большие слои по одиночке. Больших потерь на излучение, характерных для электронов, в случае частиц с большой массой не будет, так как интенсивность излучения обратно пропорциональна квадрату массы покоя излучающей частицы. С другой стороны, измерения ионизации проникающих частиц показывают, что по крайней мере для частиц с импульсом $pc < 7 \cdot 10^8$ эВ мы не можем говорить о протонах, ибо протоны с такими малыми импульсами ионизируют заметно сильнее, чем электроны. Эти аргументы вместе с уже приводившимися выше снимками тяжелых электронов в камере Вильсона придают гипотезе о существовании нового вида частиц высокую степень достоверности.

Все такие частицы обладают одинаковой массой, или же проникающая компонента содержит несколько видов частиц с различными массами — об этом эксперименты пока не говорят. Пока нельзя также решить, какая доля проникающих частиц очень высоких энергий принадлежит протонам. Однако все проделанные до сих пор измерения массы проникающих частиц можно объединить предположением, что проникающая компонента в основном состоит из одного определенного сорта частиц с массой покоя примерно в 160 раз больше, чем масса электрона, и что кроме этих частиц встречаются в относительно небольшом количестве только протоны и нейтроны.

Кроме этого предположения, у нас пока еще нет теоретических оснований, которые могли бы привести к каким-либо высказываниям о свойствах этих частиц. Но если мы все же будем предполагать, что существует определенный сорт частиц с массой покоя, примерно равной 160 электронным массам, то представляется естественным связать эти частицы с теорией ядерных сил, предложенной в 1935 г. Юкавой[88] и развитой далее им и другими исследователями[89]. Юкава предсказал в этой теории существование частиц указанного типа, предоставив этим частицам определенное место во всех взаимосвязях между ядерными силами, β-распадом и т. п. Может быть, хотя и преждевременно говорить о решительном подтверждении теории Юкавы благодаря открытию тяжелых электронов, но все же, по-видимому, естественно проанализировать экспериментальные данные о проникающей компоненте высотного излучения, основываясь на теории Юкавы. Поэтому мы дадим сначала обзор основных идей и наиболее существенных результатах теории Юкавы.

Теория Юкавы исходит из стремления провести возможно более тесную аналогию между силами, удерживающими в ядре протоны и нейтроны, и силами

[88] *Yukawa H.* Proc. Physic. Math. Soc. Jap., 1935, **17**, 48; *Yukawa H., Sakata S.* Proc. Physic. Math. Soc. Jap., 1937, **19**, 1084; *Yukawa H., Sakata S.* Proc. Physic. Math. Soc. Jap., 1937, **19**, 712; *Yukawa H., Sakata S., Taketani M.* Proc. Physic. Math. Soc. Jap., 1938, **20**.

[89] *Fröhlich H., Heitler W., Kemmer N.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 154; *Kemmer N.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 127; *Bhabha H.J.* Nature (Lond.), 1938, **141**, 117; *Bhabha H.J.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 501; *Wentzel G.* Naturwiss., 1938, **26**, 273.

электрическими. Соответственно, Юкава вводит силовое поле тяжелых ядерных частиц, которое аналогично электрическому полю описывается волновыми функциями, удовлетворяющими дифференциальному уравнению второго порядка. Однако ядерные силы отличаются от электрических сил тем, что они обладают конечным радиусом действия, равным по порядку величины классическому радиусу электрона ($r_0 = 2{,}81 \cdot 10^{-13}$ см). Поэтому Юкава заменяет уравнение для электростатического потенциала

$$\Delta\varphi = 0$$

на другое уравнение

$$\Delta\varphi - k^2\varphi = 0.$$

Это уравнение дает для потенциала решение вида e^{-kr}/r. Постоянная k определяет радиус действия ядерных сил и имеет порядок величины $k \sim 1/r_0$. Обобщая уравнение для потенциала до волнового уравнения, мы получаем

$$-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2} + \Delta\varphi - k^2\varphi = 0. \tag{34}$$

Это — волновое уравнение де Бройля для частиц с массой покоя $\mu = \hbar k/c$[90]. Таким образом, место световых квантов в теории Максвелла здесь занимают, ввиду конечного радиуса действия ядерных сил, частицы с массой покоя $\hbar k/c$, и эта масса покоя по порядку величины совпадает с массой, которая получается из немногих имеющихся экспериментов по определению массы тяжелых электронов (около 160 электронных масс). Дальнейшее различие между ядерным и электрическим полем состоит в том, что ядерное поле создает обменные силы между нейтронами и протонами. Для этого Юкава вводит предположение, что соответствующие ядерному полю частицы заряжены, вследствие чего испускание частицы Юкавы сопряжено с изменением заряда испущенной частицы таким образом, что в целом заряд сохраняется.

Из этих основных идей теории Юкавы следует, что наблюдаемые в высотном излучении тяжелые электроны, если их можно будет отождествить с частицами Юкавы, в противоположность всем другим заряженным элементарным частицам должны удовлетворять правилам статистики Бозе и обладать целочисленным спином. При самой тесной аналогии частиц Юкавы со световыми квантами следует ожидать, что частицы Юкавы имеют спин 1. Теория для этого случая развита Баба[91], Фрелихом, Гайтлером, Кеммером[92] и Юкавой[93]. По соображениям симметрии должны существовать положительно и отрицательно заряженные частицы Юкавы, причем по абсолютной величине заряд их всегда должен быть равен элементарному кванту электричества. Если силы между ядерными частицами не зависят от заряда в том смысле, в каком это предполагалось различными американскими исследователями на основании опытов Тюва, Хафстадта и Гейденбурга, то мы должны допускать, что существуют также электрически нейтральные частицы Юкавы. Однако достаточно обоснованные экспериментально или теоретически утверждения об этом делать пока еще невозможно.

---

[90] *Pauli W., Weisskopf V.* Helvet. Physic. Acta, 1935.

[91] *Bhabha H.J., Heitler W.* Op. cit.; *Bhabha H.J.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **164**, 257.

[92] *Fröhlich H., Heitler W., Kemmer N.* Op. cit.

[93] *Yukawa H., Sakata S., Taketani M.* Proc. Physic. Math. Soc. Jap., 1938, **20**.

§ 14

Распад тяжелых электронов

Юкава предполагает далее, что ядерное поле взаимодействует также с легкими частицами (электронами и нейтрино); например, электрон очень высокой энергии при отклонении в силовом поле должен испускать отрицательно заряженную частицу Юкавы, превращаясь одновременно с этим в нейтрино. Вследствие такого взаимодействия частица Юкавы может сама по себе (без взаимодействия с другим веществом) распадаться на электрон и нейтрино. Другими словами, частица Юкавы просто обладает естественной β-радиоактивностью. Время жизни частицы, связанное с интенсивностью указанного взаимодействия, можно оценить, вычисляя обычную β-активность атомных ядер из теории Юкавы. Естественная β-активность атомных ядер объясняется в этой теории с помощью предположения, что какой-нибудь нейтрон превращается в протон при одновременном испускании виртуальной частицы Юкавы, а эта виртуальная частица тотчас же распадается на электрон и нейтрино. Такое представление приводит в основном опять к теории β-распада Ферми и тем самым позволяет определить среднее время жизни тяжелого электрона, что и проделал Юкава, получив $\tau = 1/2 \cdot 10^{-6}$ с.

Учитывая, что спонтанный распад тяжелого электрона имеет важное значение при обсуждении свойств проникающей компоненты, мы рассмотрим его несколько подробнее. В соответствии с законом сохранения и импульса, покоящаяся частица Юкавы должна распадаться таким образом, чтобы обе легкие частицы разлетались точно в противоположных направлениях, с равными, но противоположно направленными импульсами. Суммарная энергия обеих легких частиц должна соответствовать массе покоя тяжелого электрона. Ввиду того, что электрон имеет незначительную, а нейтрино исчезающую массу покоя, отсюда следует, что кинетическая энергия электрона и нейтрино при распаде довольно точно равняется $\mu c^2/2$ (при этом μ означает массу тяжелого электрона). Значит, радиоактивность тяжелых электронов отличается от β-активности каких-либо атомных ядер в том отношении, что электрон должен приобретать при распаде строго определенную энергию около 40 МэВ. Испускание электрона или нейтрино должно происходить при этом с одинаковой вероятностью по всем направлениям в пространстве.

Распад тяжелого электрона часто может происходить в то время, когда тяжелый электрон еще обладает значительной кинетической энергией. В этом случае импульс испущенного электрона можно определить с помощью преобразования Лоренца. Мы предположим, что тяжелый электрон движется в направлении оси x со скоростью βc. Пусть направление испускания составляет с осью x угол φ, измеренный в системе отсчета, в которой тяжелый электрон покоится. Тогда для энергии электрона и его компоненты, параллельной или перпендикулярной оси x в системе отсчета, в которой частица Юкавы покоится, мы получаем соотношения

$$E' = \frac{\mu c^2}{2}; \quad p'_{\parallel} = \frac{\mu c}{2} \cos\varphi; \quad p'_{\perp} = \frac{\mu c}{2} \sin\varphi.$$

В системе отсчета наблюдателя мы тогда имеем

$$E = \frac{\mu c^2}{2} \frac{1 + \beta\cos\varphi}{\sqrt{1-\beta^2}}; \quad p'_{\parallel} = \frac{\mu c}{2} \frac{\beta + \cos\varphi}{\sqrt{1-\beta^2}}; \quad p'_{\perp} = \frac{\mu c}{2} \sin\varphi.$$

Выражая теперь скорость частицы Юкавы через ее импульс P, находим

$$E = \frac{c}{2}\left(\sqrt{(\mu c)^2 + P^2} + P\cos\varphi\right);$$
$$p_{\|} = \frac{1}{2}\left(P + \sqrt{(\mu c)^2 + P^2}\cos\varphi\right); \quad p_{\perp} = \frac{\mu c}{2}\sin\varphi. \tag{35}$$

Когда энергия частицы Юкавы существенно превосходит энергию ее массы покоя, то электрон при радиоактивном распаде в большинстве случаев будет вылетать также почти по направлению движения частицы Юкавы. Его импульс в этом направлении может с равной вероятностью принимать все значения от 0 до P.

Если мы хотим определить по вероятности распада частицы Юкавы $1/\tau$ длину ее пробега до распада, если мы, следовательно, задаем вопрос о вероятности распада на 1 см пробега, то, как подчеркивал Баба, необходимо принимать во внимание замедление времени согласно теории относительности. Для вероятности распада на 1 см пробега мы получаем

$$w = \frac{\mu}{\tau P}. \tag{36}$$

§ 15

Вторичные процессы, обусловленные тяжелыми электронами

В теории Юкавы взаимодействие между протонами, нейтронами и тяжелыми электронами рассматривается аналогично взаимодействию между легкими и тяжелыми частицами в теории Ферми[94], и из этого рассмотрения следует вывод, имеющий значение для обсуждения ливней и толчков Гофмана (§ 23, 24). Именно, взаимодействие между тремя названными выше видами частиц становится тем сильнее, чем больше энергия частиц, участвующих в столкновении[95]. Это приводит к тому, что тогда, когда в одном столкновении имеется энергия значительно выше 10^8 эВ, эта энергия в общем случае расходуется на то, чтобы в одном отдельном акте произвести ряд частиц, энергия которых будет находиться где-то в области около нескольких единиц, умноженных на 10^8 эВ[96]. Такой ливень взрывного характера по теории Юкавы (в противоположность теории β-распада Ферми) должен состоять в основном только из протонов, нейтронов и тяжелых электронов. И лишь с уменьшенной на множитель $e^2/\hbar c$ или $(e^2/\hbar c)^2$ вероятностью должны возникать также световые кванты и обыкновенные электроны. Получить из теории Юкавы какие-либо более точные выводы об этих взрывах нельзя потому, что появление взрывов как раз обозначает границу применимости существующей теперь квантовой теории[97].

Составляя по этим теоретическим представлениям картину процессов, которые разыгрываются при прохождении тяжелого электрона через вещество, мы приходим примерно к следующему результату. Прежде всего тяжелый электрон действует на окружающее его вещество своим зарядом, производит таким образом ионизацию и из-за этого тормозится совершенно так же, как протоны и электроны. Здесь можно без сомнений применять обычные формулы для потерь энергии на 1 см (2) и для пробега в зависимости от энергии (II). Далее, при прохождении через атомные ядра тяжелый электрон может вступать во взаимодействие с протонами и нейтронами.

---

94) *Fermi E.* Zs. Phys., 1934, **88**, 161.

95) *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 529.

96) *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1936, **101**, 533.

97) *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1936, **101**, 533; *Heisenberg W.* Ann. Phys., 1938, **37**, 20; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 529.

Это взаимодействие не может быть описано силой в духе классической теории, но его можно сравнивать с взаимодействием между световыми квантами и электронами. Следовательно, частица Юкавы, во-первых, может поглощаться в ядре, что возможно только при одновременном превращении нейтрона в протон (аналог фотоэффекта). Во-вторых, она может рассеяться на тяжелых частицах, причем в общем случае при рассеянии будет изменяться и ее энергия (аналог эффекта Комптона). При высоких энергиях тяжелого электрона второй процесс происходит чаще первого. Ибо при поглощении частицы Юкавы для сохранения энергии и импульса необходимо, чтобы взаимодействие происходило в присутствии двух тяжелых частиц. Рассеяние же может происходить уже на одной единственной частице в пустоте. При энергии тяжелого электрона порядка 10^8 эВ эффективное сечение этого процесса рассеяния по порядку величины составляет около 10^{-26} см^2. Кроме того, существуют процессы, которые вызываются взаимодействием ядерных сил с электрическими, на что обратил внимание Гайтлер. В качестве простейшего из таких процессов можно привести, например, следующий. Отрицательно заряженная частица Юкавы сталкивается с протоном. Последний превращается в нейтрон, причем освобождается один световой квант. Эффективное сечение этого процесса для частицы Юкавы с энергией $\sim 10^8$ эВ составляет, по оценке Гайтлера, около 10^{-27} см^2. Если частица Юкавы с энергией, значительно превышающей 10^8 эВ, встретит протон или нейтрон, то в общем случае произойдет упомянутый выше взрыв. В этих взрывах кроме тяжелых электронов, как уже говорилось, могут участвовать протоны и нейтроны, а также световые кванты и электроны, но с уменьшенной на множитель $e^2/\hbar c$ или, соответственно, $(e^2/\hbar c)^2$ вероятностью.

Эффективное сечение для взрывов должно иметь порядок величины 10^{-26} см^2; однако возможно, что это эффективное сечение уменьшается с ростом энергии сталкивающихся частиц. Сделать какое-либо определенное утверждение по этому поводу существующая сейчас теория не позволяет.

Упоминавшиеся до сих пор процессы приводят к потерям энергии, в основном пропорциональным массе, т. е. потери энергии на 1 г/см^2 должны быть приблизительно одинаковыми во всех материалах.

Наконец, частица Юкавы может спонтанно распадаться на электрон и нейтрино. Этот процесс происходит совершенно независимо от материала, пронизываемого частицей, и потому о пропорциональности поглощения массе здесь не может быть и речи. Правда, можно думать, что наряду со спонтанным существует и еще один распад, индуцируемый взаимодействием с другим веществом. Однако простые теоретические оценки показывают крайне малую вероятность того, чтобы этот индуцированный распад вносил в поглощение заметный по сравнению со спонтанным распадом вклад.

§ 16

Вторичные процессы, обусловленные быстрыми протонами и нейтронами[98)]

В проникающей компоненте высотного излучения некоторая роль принадлежит также протонам и нейтронам. Правда, сейчас едва ли можно сказать, какая часть проникающих лучей высокой энергии состоит из протонов. Однако эксперименты, во всяком случае, все время указывают на появление тяжелых частиц с небольшой энергией. Эти тяжелые частицы, в соответствии с приведенными выше теоретическими соображениями, могут вызывать в первую очередь следующие процессы,

---

[98)] *Heisenberg W.* Naturwiss., 1937, **25**, 749; *Heisenberg W.* Sächs. Akad. Wiss., 1937, **89**, 369.

из которых ионизация протонами в основном была уже рассмотрена во введении. При столкновении с атомными ядрами протоны и нейтроны могут вступать в обменное взаимодействие с ядерными частицами. Таким образом, при прохождении через атомные ядра тяжелые частицы (в отличие от частиц Юкавы) ведут себя совершенно аналогично электронам в веществе. С помощью ядерных сил, обладающих радиусом действия, равным по порядку величины 10^{-13} см, пролетающий через ядро протон высокой энергии может передавать свою энергию ближайшим к нему протонам или нейтронам, т. е. образовывать вторичные частицы с определенным энергетическим спектром. По теории Бора[99], при этом большая часть энергии протона, попавшего в ядро, расходуется на нагревание атомного ядра, а ядро вследствие нагревания начинает затем испускать протоны и нейтроны, как бы испаряясь. Часть ядерных частиц, непосредственно испытавших удар налетающих протонов или нейтронов и получивших достаточную энергию, может также покидать ядро и появляться в виде вторичных частиц.

Энергия, передаваемая 1 см ядерного вещества протоном или нейтроном, летящим со скоростью βc, дается приближенной формулой[100]

$$\frac{\partial E}{\partial x} \simeq -\frac{Mc^2}{r_0\beta^2}\cdot 6\cdot 10^{-3}, \tag{37}$$

(r_0 — классический радиус электрона, M — масса протона). Отсюда для длины пробега тяжелой частицы R в зависимости от кинетической энергии E получается[101]:

$$R \simeq r_0\frac{E^2}{Mc^2(Mc^2+E)}\cdot 1{,}7\cdot 10^2. \tag{37a}$$

Из этих формул следует, что протоны и нейтроны, движущиеся почти со скоростью света, передают атомному ядру в среднем лишь малую энергию (порядка 20 МэВ). Напротив, менее быстрые частицы, например, протоны с энергией $3\cdot 10^8$ эВ, при прохождении через атомное ядро могут потерять всю свою энергию.

При столкновении с протонами или нейтронами часть ядерных частиц, получивших достаточную энергию, может покинуть ядро и образовать вторичные частицы. Энергетический спектр этих вторичных частиц не зависит от энергии ударяющей частицы, если только энергия последней значительно выше энергии вторичных частиц. Этот спектр также почти не зависит от величины атомного ядра-мишени. Количество вторичных частиц $n(E)$ с энергией больше E приближенно определяется по формуле[102]:

$$n(E) \simeq \mathrm{const}\cdot\exp\left\{-78\frac{E}{Mc^2}\right\}. \tag{38}$$

Наряду с этими процессами, проявляющими большое сходство с обычными процессами, происходят еще и другие процессы, которые можно сравнить с тормозным излучением электронов и которые могут играть главную роль при больших энергиях ударяющей частицы. Протон высокой энергии при соударении с другой тяжелой частицей может испускать частицу Юкавы, превратившись при этом в нейтрон. При достаточно высокой энергии он может произвести в одном столкновении много

[99] *Bohr N.* Nature (Lond.), 1936, **137**, 344.

[100] *Heisenberg W.* Naturwiss., 1937, **25**, 749; *Heisenberg W.* Sächs. Akad. Wiss., 1937, **89**, 369.

[101] Ibid.

[102] Ibid.

тяжелых электронов и других тяжелых частиц, например, в обсуждавшихся ранее взрывах. Эффективное сечение для этих процессов, как и для соответствующих процессов с частицами Юкавы, должно составлять по порядку величины 10^{-26} см^2.

IV

СПЕКТРЫ И ПОГЛОЩЕНИЕ КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧЕЙ

§17

Основные эмпирические факты[103]

При феноменологическом описании космических лучей вслед за Оже принято различать *жесткую* и *мягкую компоненты*, причем под «жесткой компонентой» понимается та часть ионизирующих лучей, которая проникает на глубину более чем 10 см свинца, а под «мягкой компонентой» — часть, которая задерживается в 10 см Pb[104]. Это различие основывается на опытах с совпадениями, представленных на рис. 9. На нем изображены числа совпадений в расположенных по прямой линии счетчиках в зависимости от толщины слоя свинца, помещаемого между счетчиками. Мы видим, что частота совпадений резко падает в первых 10 см Pb и затем переходит в медленно спадающую кривую; эти две ветви кривой поглощения можно объяснить тем, что в излучении имеются две компоненты, первая из которых поглощается уже на коротком пробеге, а вторая поглощается в свинце слабее.

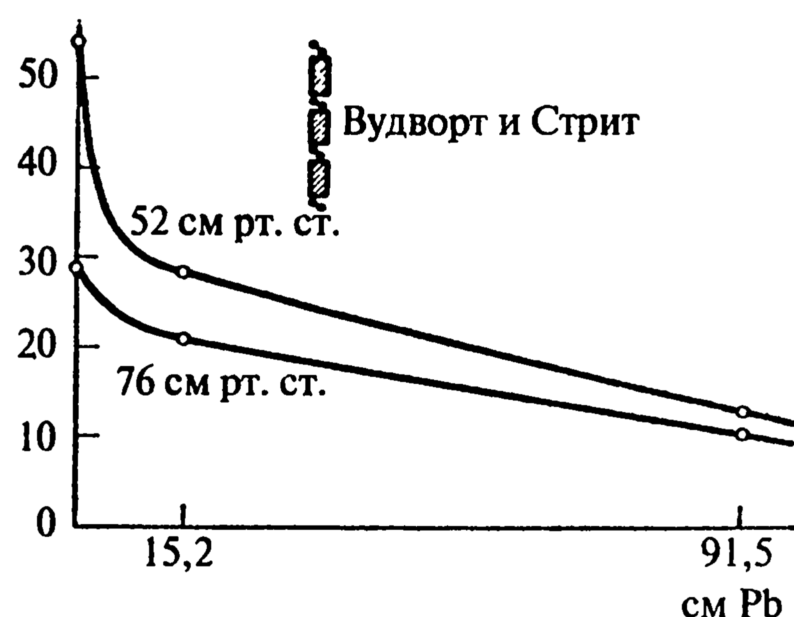


Рис. 9. Поглощение совпадений в свинце по Вудворду и Стриту. Абсцисса: толщина слоя поглотителя. Ордината: частота совпадений по измерениям Вудворда и Стрита на двух различных высотах, соответствующих 76 см рт. ст. и 52 см рт. ст.

Съемки в камере Вильсона, обсуждавшиеся во введении, показывают, что мягкая компонента состоит из электронов и позитронов, которые подвергаются превращению и поглощению уже на первых сантиметрах свинца[105], и что жесткая компонента содержит тяжелые электроны, т. е. частицы с массой 100–200 электронных масс. Вопрос о том, содержит ли жесткая компонента при энергиях выше 10^9 эВ также существенную примесь протонов или других тяжелых частиц, пока еще не имеет ответа. Мы будем пока предполагать здесь, что жесткая компонента состоит преимущественно из тяжелых электронов и что совпадения соответствуют этому предположению.

Доля мягкой компоненты в общих ионизирующих лучах составляет, как можно увидеть из рис. 9, примерно 30 % на уровне моря; по измерениям Оже[106] с сотрудниками она уменьшается на глубине 1,5 м под водой на 15 % и на глубине 8 м под землей на 7 %[107], но возрастает на 50 % на высоте, соответствующей

---

[103] См. *Miehlnickel E.* Op. cit.; *Steinke E. G.* Erg. exakt. Naturwiss., 1934, **13**, 89.

[104] *Auger P.* Züricher Vortrag in der Sammlung "Kernphysik". Berlin: Julius Springer, 1936; *Auger P., Leprince-Riguet L., Ehrenfest P.* J. Physique et Radium, 1936, **2**, 58.

[105] См. *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.

[106] *Auger P.* Züricher Vortrag in der Sammlung "Kernphysik". Berlin: Julius Springer, 1936.

[107] По Эмерту доля, задержанная в слое 5 см свинца, составляет во всяком случае от 15 % до 20 % в Боденском озере (*Ehmert A.* Zs. Phys., 1937, **106**, 751). Однако вопрос о том, насколько этот результат можно сравнивать с данными измерительной аппаратуры Оже с сотрудниками, нуждается в более детальном выяснении.

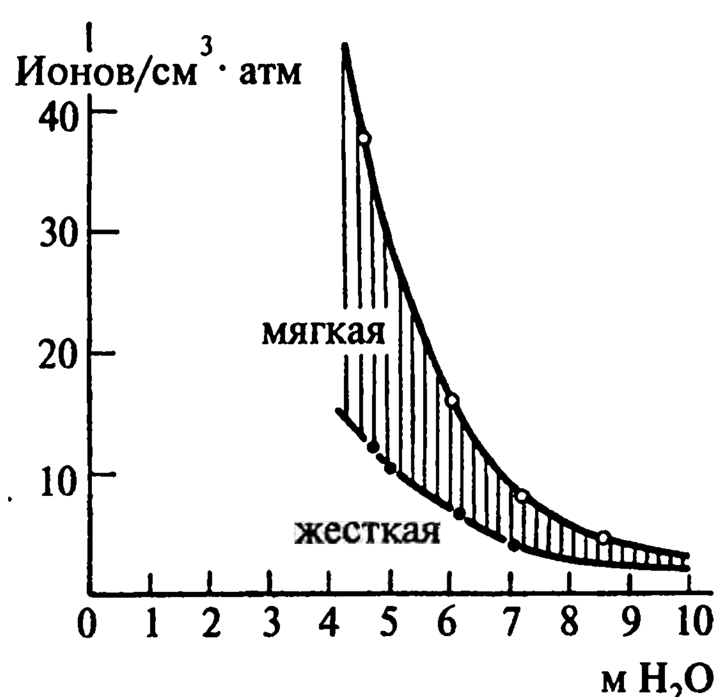


Рис. 10. Жесткая и мягкая компонента в нижней атмосфере по Боуэну, Милликену и Нееру[108]. Абсцисса: глубина атмосферы в м воды. Ордината: ионизация без панциря (ооо) и с панцирем 10 см свинца (•••) по измерениям Милликена (Марчфилд, Калифорния). Заштрихованная область: вклад мягкой компоненты

50 см рт. ст. На большей высоте над поверхностью Земли отношение мягкого излучения к жесткому вначале продолжает медленно возрастать, как показывают измерения ионизации Боуэном, Милликеном и Неером (рис. 10).

Измерение полной интенсивности с высотой над поверхностью Земли показано на рис. 11 и 12. На рис. 11 представлены совпадения по вертикали, зарегистрированные Пфотцером[109] с применением счетчиков на шарах-зондах. *Интенсивность по вертикали* вначале возрастает на высоте, соответствующей 50 см рт. ст., вдвое по сравнению с поверхностью Земли и, в конце концов, достигает в стратосфере максимального значения, превышающего интенсивность на уровне моря в 40 раз. В самом верхнем слое атмосферы, эквивалентном менее чем 8 мм рт. ст., снова наблюдается спад числа совпадений.

На рис. 12 представлено число совпадений в Боденском озере по Эмерту[110]. Мы видим, что здесь интенсивность на 1 г/см^2 спадает значительно медленнее, чем в стратосфере, и что спад ее с глубиной T может быть представлен степенным законом $T^{-\gamma}$, в котором показатель степени γ на глубине более 50 м под водой составляет по Эмерту 1,87[112].

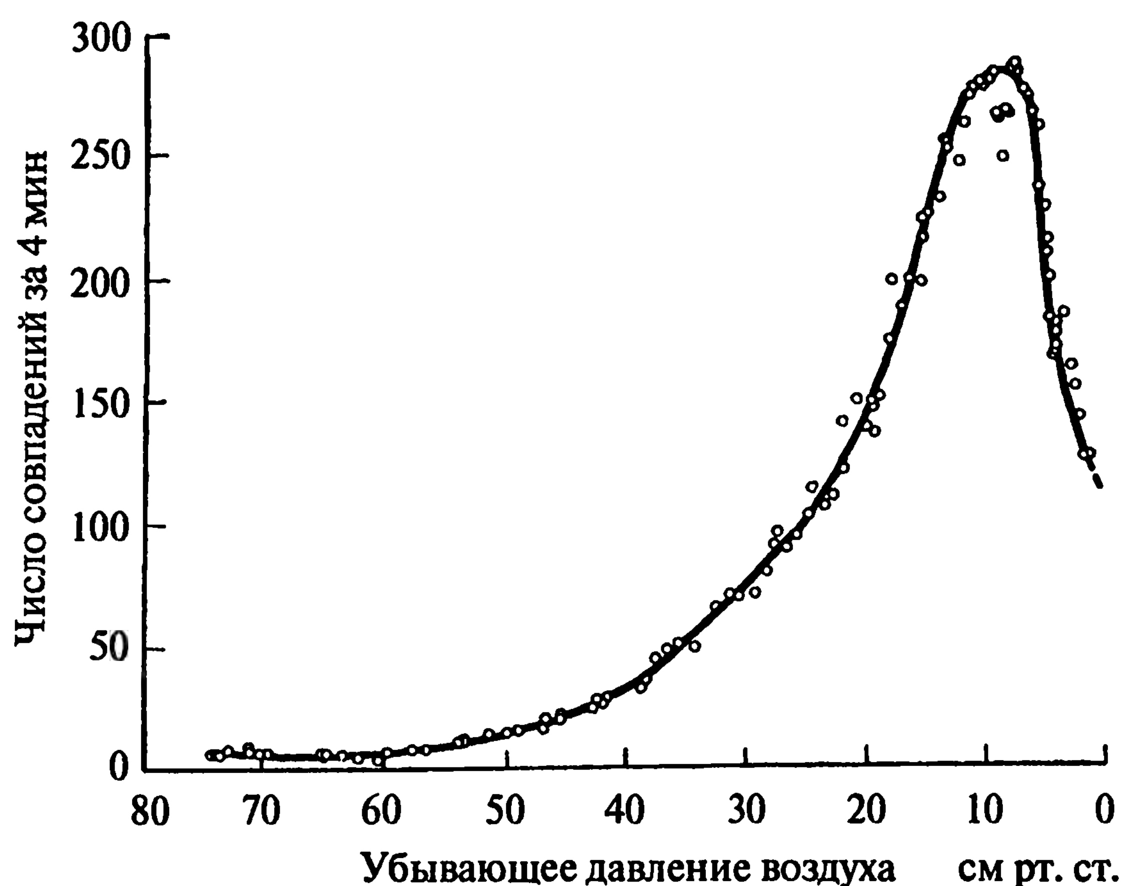


Рис. 11. Интенсивность космических лучей по вертикали в атмосфере по Пфотцеру[111]. Абсцисса: глубина атмосферы в см рт. ст. Ордината: число совпадений

Несколько большее, чем при совпадениях по вертикали, отношение интенсивности в стратосфере к интенсивности в Боденском озере получается при измерениях *ионизации*, т. е. всестороннего излучения, как показано на верхней кривой рис. 13[113]. При некоторых упрощающих предположениях о поглощении косых лучей в атмосфере, по Гроссу[114], из интенсивности по вертикали можно рассчитать ионизацию и наоборот[115].

108) *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1934, **46**, 645.
109) *Pfotzer G.* Zs. Phys., 1936, **102**, 23.
110) *Ehmert A.* Zs. Phys., 1937, **106**, 751.
111) *Pfotzer G.* Zs. Phys., 1936, **102**, 23.
112) *Ehmert A.* Zs. Phys., 1937, **106**, 751; *Wilson V. C.* Phys. Rev., 1937, **52**, 559; 1938, **53**, 337.
113) *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.
114) *Gross B.* Zs. Phys., 1933, **83**, 214.
115) См. *Pfotzer G.* Op. cit.

При интегрировании ионизации по атмосфере получается полная энергия, приходящая из космического пространства[117]. Ведь эта энергия в конце концов когда-нибудь полностью израсходуется на образование ионов, как только она проникнет достаточно глубоко в вещество Земли. Регенер[118] находит для полной ионизации величину $6{,}1 \cdot 10^9$ пар ионов в минуту на 1 см^2; следовательно (§ 9), поток энергии $1{,}9 \cdot 10^{11}$ эВ/мин · см^2. Боуэн, Милликен и Неер[119] указывают для потока энергии значение $1{,}7 \cdot 10^{11}$ эВ/мин · см^2.

Теперь мы сравним с распределением интенсивности по глубине спектральное распределение интенсивности по различным интервалам энергии. Рис. 16 показывает *спектр* проникающих частиц на уровне моря по Блэккету[120]. По оси абсцисс отложено значение импульса $H\rho$, по оси ординат — значение частоты частиц в интервале импульса. Полную энергию проникающих частиц на уровне моря можно оценить отсюда величиной около $6 \cdot 10^9$ эВ/мин · см^2.

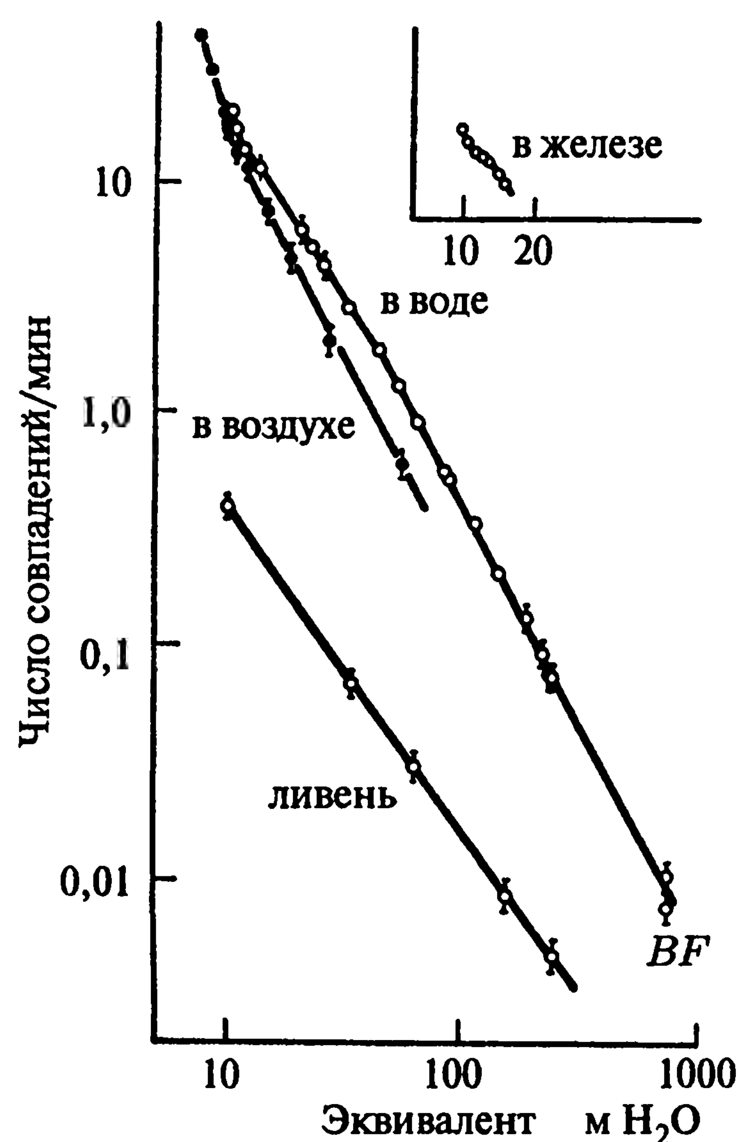


Рис. 12. Интенсивность по вертикали в Боденском озере по Эмерту[116]. Абсцисса: глубина в м воды от границы атмосферы (в логарифмическом масштабе). Ордината: число совпадений (в логарифмическом масштабе). Самая нижняя экспериментальная точка *BF* взята по измерениям Барноти и Форро, проведенным в шахтах. Кривая «в воздухе» была снята Эмертом при измерении совпадений по наклонной прямой

§ 18
Качественное теоретическое рассмотрение

Ход интенсивности по вертикали в верхней атмосфере можно понять на основе каскадной теории, если предположить, что электроны или световые кванты приходят из космического пространства[121]. Эти электроны затем размножаются в первом слое и поглощаются в последующих слоях, теряя энергию, и они дают таким образом кривую интенсивности в атмосфере (рис. 11), очень похожую на кривые рис. 7, полученные из каскадной теории. Поскольку радиационная единица длины ($l = 1$, таблица 2) в воздухе (275 мм нормального воздуха) соответствует разнице давлений 2,6 см рт. ст. или 0,34 м водяного столба, то измерение интенсивности на порядок своей величины происходит при этом всегда на участках, отвечающих нескольким сантиметрам ртутного столба. Из положения максимума при 8 см рт. ст. ($l \simeq 3$)

---

[116] *Ehmert A.* Zs. Phys., 1937, **106**, 751.

[117] *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.

[118] *Regener E.* Nature (Lond.), 1933, **131**, 130.

[119] *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.

[120] *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **159**, 1; см. также *Kunze P.* Op. cit.; *Herzog G., Scherrer P.* J. Physique et Radium, 1935, **6**, 489; *Anderson C. D.* Op. cit.

[121] *Bhabha H. J., Heitler W.* Op. cit.; *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.

мы можем, используя рис. 7 и таблицу 14, получить для средней начальной энергии оценку в несколько единиц, умноженных на 10^9 эВ. Более точное сравнение излучения в верхней атмосфере с каскадной теорией мы проведем в § 19. При этом будет показано, что, хотя мягкое излучение в верхней атмосфере можно приписывать каскадному ливнеобразованию, однако электроны в нижней атмосфере следует объяснять другими процессами, связанными с проникающей компонентой[122].

При рассмотрении проникающей компоненты мы будем исходить из теории Юкавы (гл. III). По этой теории тяжелые электроны нестабильны, т. е. они могут распадаться и в пустоте. Поэтому мы должны предполагать, что они не могут длительно существовать и в космическом пространстве и что тяжелые электроны, которые мы находим на поверхности Земли, образуются только в атмосфере из мягкого излучения[123]. Правда, образование проникающих частиц в атмосфере еще не доказано при измерениях с помощью шаров-зондов (которые в этом случае должны были бы обнаружить новый спад интенсивности проникающих частиц в самой верхней атмосфере). Однако мы можем считать его возможным[124] на основании того факта, что энергия, содержащаяся в проникающей компоненте, $\sim 6 \cdot 10^9$ эВ/мин · см^2, мала по сравнению с полной энергией $2 \cdot 10^{11}$ эВ/мин · см^2, попадающей на верхнюю границу атмосферы[125].

Возможность образования тяжелых электронов в атмосфере обеспечивается обращением процессов, обсуждавшихся в § 15 в рамках теории Юкавы. Световой квант высокой энергии при столкновении с тяжелой частицей может образовать одну или несколько частиц Юкавы[126]. Но так как ход этих процессов в области высоких энергий в силу ограниченности сегодняшней теории пока еще не поддается расчету (гл. III), мы будем рассматривать здесь образование тяжелых частиц полуэмпирически. Мы будем ожидать, что тяжелые электроны чаще всего образуются в стратосфере, потому что там интенсивность мягкого излучения наибольшая, и поэтому мы будем несколько схематически предполагать, что спектр тяжелых частиц, который зависит от энергии примерно таким же образом, как спектр исходных электронов, возникает вблизи максимума ионизации (~ 8 см рт. ст.). Допустимо ли это простое предположение, мы увидим несколько позже, рассматривая ход спектра Блэккета на поверхности Земли. Этот спектр тяжелых электронов при распространении в атмосфере и в Земле будет подвергаться следующим воздействиям.

Во-первых, он будет тормозиться вследствие ионизации. Тогда из теории ионизации можно вывести с известным приближением закон поглощения проникающих частиц (§ 20).

Во-вторых, тяжелые электроны будет спонтанно распадаться на электроны и нейтрино. Этот процесс, как будет показано, вносит значительный вклад в поглощение проникающей компоненты в атмосфере (§ 20), так что возникающие при этом электроны образуют, вероятно, существенную часть мягкого излучения в нижней атмосфере, интенсивность которого может быть определена из постоянной распада Юкавы (§ 21).

В-третьих, тяжелые частицы при столкновении с атомными ядрами будут вызывать процессы, о которых говорилось в § 15. Как показывает обсуждение эмпирического материала, мягкое излучение, возникающее в этих процессах, можно, вероятно, наблюдать только под водой вместе с ионизационными ливнями (§ 12),

---

[122] *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.

[123] *Wentzel G.* Op. cit.; *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.

[124] *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.

[125] Согласно любезному сообщению П. Блэккета.

[126] *Wentzel G.* Op. cit.; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **166**, 529.

тогда как в нижней атмосфере оно по сравнению с электронами спонтанного распада отступает на задний план.

§ 19

Каскадный спектр электронов в верхней атмосфере. Широтный эффект

При более детальном рассмотрении каскадного излучения в атмосфере мы будем исходить из измерений ионизации, проделанных Боуэном, Милликеном и Неером[128] на различных широтах и воспроизведенных на рис. 13. Грубые различия стратосферной интенсивности на различных широтах могут быть поняты по Штермеру[129], Леметру и Валларта[130], если предположить, что излучение, приходящее из космического пространства, в значительном количестве содержит заряженные частицы. Действительно, заряженные частицы могут проникнуть через магнитное поле Земли на геомагнитной широте φ лишь тогда, когда их импульс будет больше характерного для каждой широты предельного импульса[131]:

$$pc = E_\varphi = 1{,}9 \cdot 10^{10}\ \text{эВ} \cdot \cos^4 \varphi.$$

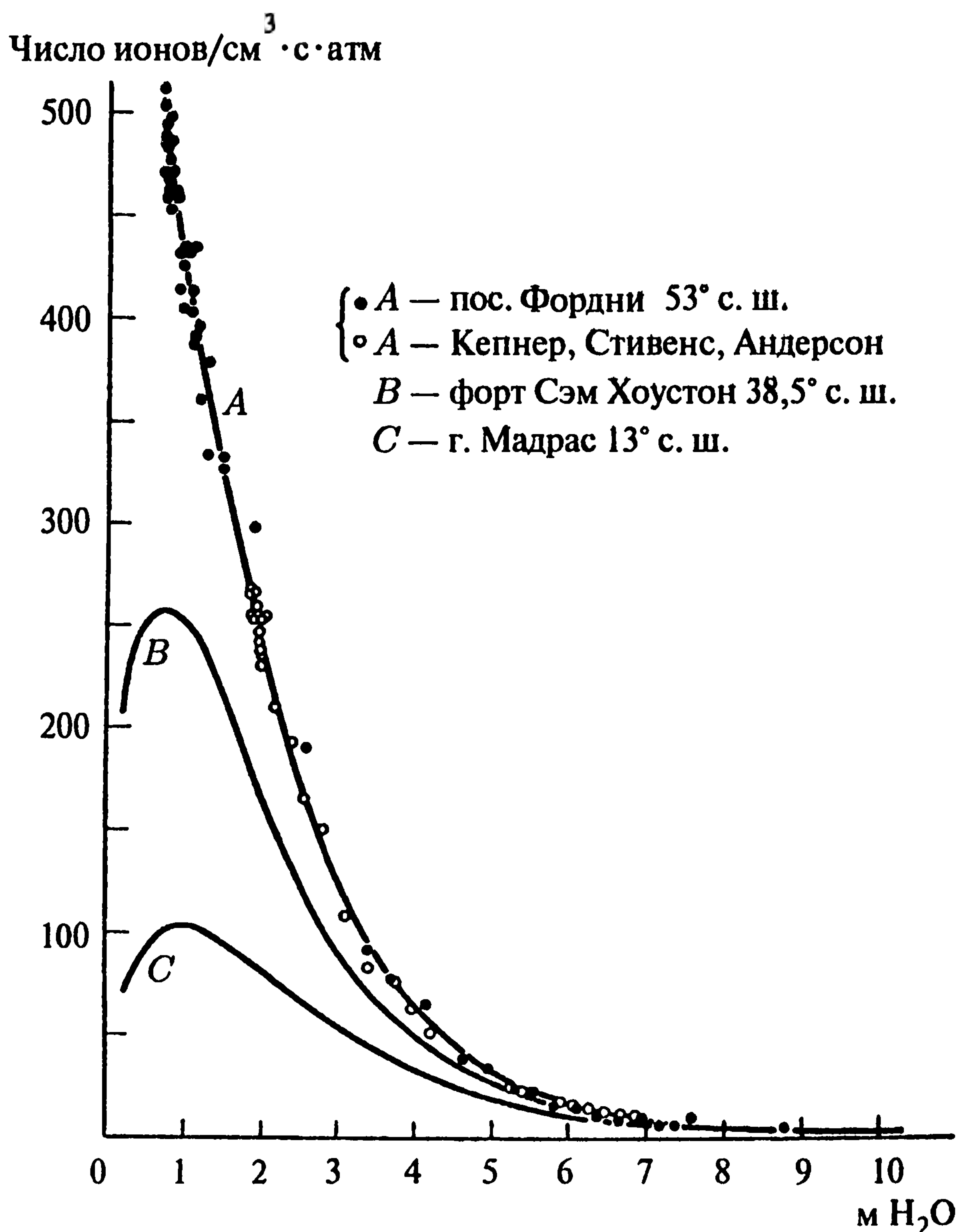


Рис. 13. Ионизация в атмосфере на трех различных широтах по измерениям Боуэна, Милликена и Неера[127]

φ (°) =	0	20	40	60	80	90
$E_\varphi \cdot 10^{-10}$ (эВ) =	1,9	1,5	0,65	0,12	0,0017	0

(39)

При этом предполагается, что заряд частиц равен элементарному заряду.

Следовательно, на экватор может попасть меньшее число электронов, чем в более высоких широтах; поэтому на рис. 13 максимум ионизации на экваторе ниже, чем вблизи полюса. Далее, на экваторе средняя энергия падающих частиц

[127] *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80.
[128] *Bowen J. S., Millikan R. A.* Phys. Rev., 1938, **53**, 217.
[129] *Störmer C.* Zs. Astrophys., 1930, **1**, 237; 1937, **2**, 4.
[130] *Lamaître G., Vallarta M. S.* Phys. Rev., 1933, **43**, 87.
[131] *Street J. C., Woodward R. H., Stevenson E. C.* Phys. Rev., 1935, **47**, 891.

выше, чем вблизи полюса; поэтому более плоский экваториальный максимум появляется только при более толстом слое, чем максимум на высоких широтах[132)].

В соответствии с формулой (39) изменяющуюся по широте часть ионизации, т. е. разность кривых для различных широт 53°–38°, 38°–3°, мы должны понимать как результат действия электронов в узком интервале энергии

$$2{,}5\cdot 10^9 \text{ эВ} < E < 6{,}7\cdot 10^9 \text{ эВ}, \quad 6{,}7\cdot 10^9 \text{ эВ} < E < 17\cdot 10^9 \text{ эВ},$$

т. е. как результат действия электронов почти определенной энергии[133)]

$$E \simeq 4\cdot 10^9 \text{ эВ}, \quad E \simeq 10^{10} \text{ эВ}. \tag{39a}$$

С другой стороны, каскадная теория для интенсивности образовавшихся в атмосфере электронов этих энергий, $y = 3{,}3$, $y = 4{,}2$ дает формулу (14) и рис. 7. Сравнение экспериментального и теоретического широтного эффекта показано на рис. 14, взятом из работы Милликена и Неера[135)].

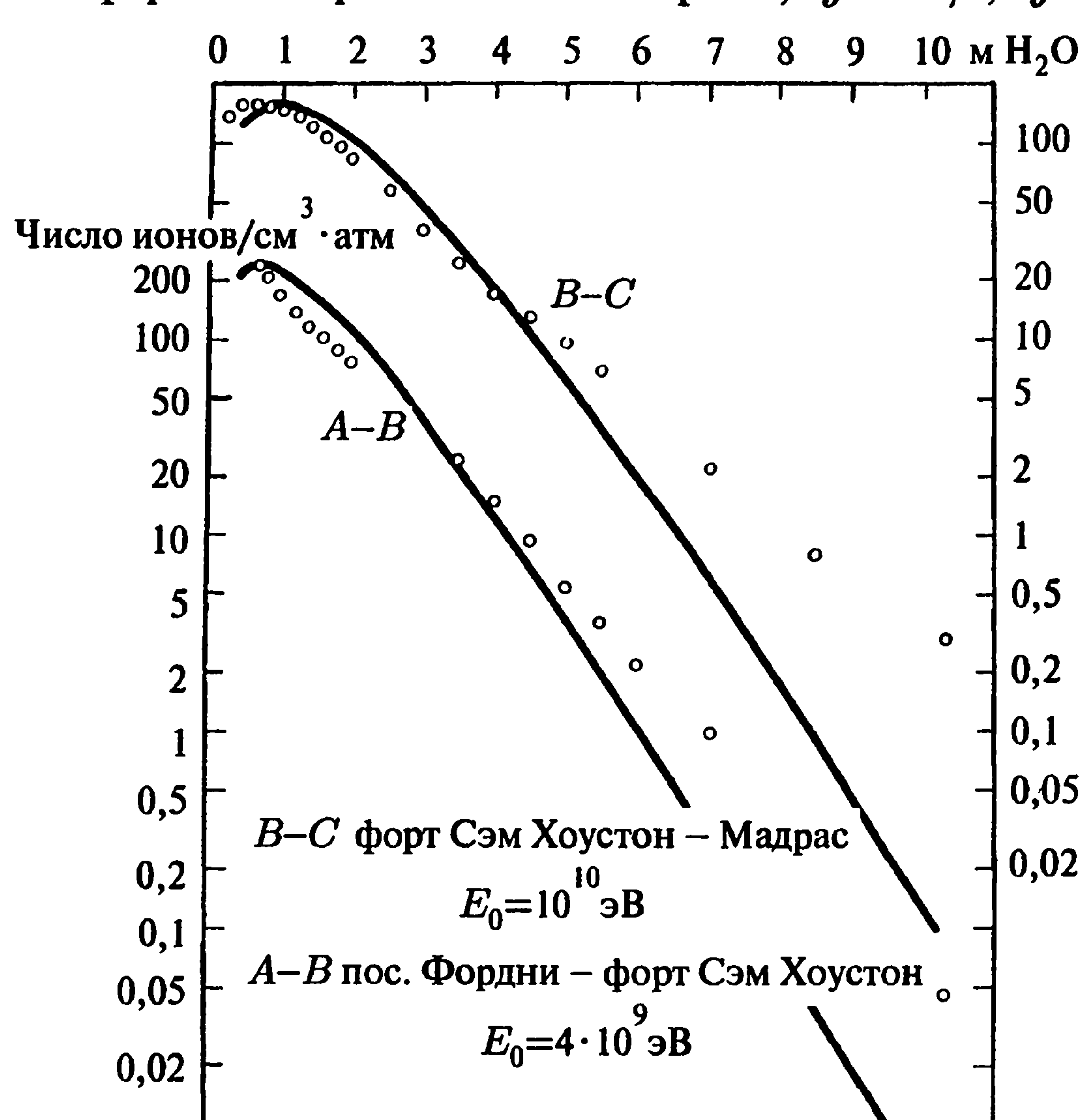


Рис. 14. Сравнение широтно зависимой части ионизации с каскадной теорией по Боуэну, Милликену и Нееру[134)]. Разность между кривыми на рис. 13 в логарифмическом масштабе.
——— — каскадная теория, ○ ○ ○ — измерения

Как мы видим, ход измерений в *верхней атмосфере* может быть описан каскадной теорией, если отвлечься от небольшого расхождения в положении максимумов, обусловленного усреднением по формулам (39а)[136)].

Однако в *нижней атмосфере* интенсивность, вычисленная по каскадной теории, оказывается значительно меньше измеряемой интенсивности мягкой компоненты, составляющей по Оже и Лепринс-Риге[137)] *на всех широтах* одну и ту же часть полного излучения на уровне моря, равную примерно 1/3. Отсюда мы должны сделать вывод, что электроны в нижней атмосфере появляются в результате вторичных процессов, вызываемых проникающей компонентой[138)]. К этому же выводу мы придем позднее на основании высотной зависимости толчков Гофмана (§ 13).

132) *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261; 1938, **166**, 529.

133) *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217.

134) Ibid.

135) Ibid.

136) *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1938, **53**, 694.

137) *Auger P., Leprince-Riguet L.* Nature (Lond.), 1934, **133**, 138.

138) *Bowen J. S., Millikan R. A., Neher H. V.* Phys. Rev., 1937, **52**, 80; 1938, **53**, 217. Это еще яснее следует из рис. 14, если учесть преобразование Гросса (§ 17).

Мы рассмотрим теперь действие электронов с энергией выше магнитной энергии E_φ, которое обсуждалось Нордгеймом[139] и Гайтлером[140]. Для этого мы предположим, что из космического пространства налетают электроны со спектром

$$F_1(E',0) = J_0 \left(\frac{10^8 \text{ эВ}}{E'}\right)^\gamma \tag{40}$$

выше энергии E' (причем постоянные γ, J сначала мы будем считать неопределенными), и поставим вопрос о спектре $F_1(E,l)$, который устанавливается на глубине l от границы атмосферы и, в частности, на уровне моря при $l = 29$.

Как показал Нордгейм[141], для более глубоких слоев ($l \gtrsim 15$) спектр $F_1(E,l)$ опять имеет вид первоначального степенного закона (40), а интенсивность спектра $F_1(E,l)$ убывает в атмосфере экспоненциально с показателем тем большим, чем сильнее степень спада γ.

Ибо в соответствии с § 10 мы имеем

$$F_1(E,l) = \int\limits_{\substack{E'=E_\varphi \text{ для } E<E_\varphi \\ E'=E \text{ для } E>E_\varphi}}^{\infty} z\left(l, \ln\frac{E'}{E}\right)\left(-\frac{\partial F_1(E',0)}{\partial E'}\right) dE' \quad (E \geqslant E_j),$$

или, подставляя $E'/E = e^{y'}$ и формулу (40),

$$\left(\frac{10^8 \text{ эВ}}{E}\right)^\gamma \int\limits_{\substack{y'=\ln\frac{E_\varphi}{E} \text{ для } E<E_\varphi \\ y'=0 \text{ для } E>E_\varphi}}^{\infty} z(l,y')\, e^{-\gamma y'}\gamma\, dy'.$$

Для больших l значение интеграла почти не зависит от E и тем самым от широты φ; в соответствии с формулой (19) интеграл спадает с l экспоненциально; численный расчет дает

$$F_1(E,l) \simeq 4J_0\left(\frac{10^8 \text{ эВ}}{E}\right)^\gamma e^{-f(\gamma)(l-10)}, \tag{41}$$

где

$$f(\gamma) \simeq 0{,}36\sqrt{\gamma-1} \quad (\gamma \lesssim 5).$$

По Нордгейму, для $l \to \infty$ более точная формула имеет вид

$$f(\gamma) = \frac{4}{3} - \frac{1}{\gamma+1} - \sqrt{\left(\frac{2}{3} - \frac{1}{1+\gamma}\right)^2 + \frac{4}{3(\gamma+1)\gamma}}\ . \tag{42}$$

При вычислении интенсивности для более тонких слоев получается максимум, который в наших широтах (для γ от 1,5 до 2,5) наступает при $l =$ от 3 до 4, причем интенсивность в нем достигает значения $J_1 \simeq 4J_0$[142].

[139] *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1937, **51**, 1110; *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1938, **53**, 694.

[140] *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261.

[141] *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1937, **51**, 1110.

[142] *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261; *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1938, **53**, 694.

Постоянную J_1 можно определить из измерений Пфотцера в стратосфере:

$$4J_0 \simeq J_1 \simeq 40 \text{ см}^{-2} \cdot \text{мин}^{-1}.$$

Труднее определить постоянный показатель спада γ. Из условия, что интенсивность каскадного спектра на поверхности Земли ($l = 29$) должна быть не больше истинной интенсивности электронов ($\sim 1/2$ см$^{-2} \cdot$ мин$^{-1}$), мы получаем для показателя оценку снизу: $\gamma > 1{,}3$.

Еще одну оценку можно получить из широтного эффекта (рис. 14), предполагая, что спектр частиц, приходящих из космического пространства, содержит преимущественно электроны и позитроны при сравнительно малом количестве световых квантов. В этом случае энергия приходящих извне частиц $\left(\int_{E_\varphi}^{\infty} -\frac{\partial F_1}{\partial E} E\, dE\right.$ по формуле $\left.(40)\right)$ должна вести себя как

$$\left(\frac{1}{E_\varphi}\right)^{\gamma-1},$$

где E_φ означает магнитную предельную энергию (39).

Из измерений Боуэна, Милликена и Неера теперь получается

$$\gamma \simeq 1{,}8.$$

Это значение следует из приводимой ниже таблицы Джонсона[143]:

	Широта		
	3°	39°	52°
Интенсивность ионов, см$^{-2} \cdot$ мин$^{-1}$	$1{,}8 \cdot 10^9$	$3{,}2 \cdot 10^9$	$6 \cdot 10^9$
Интенсивность энергии, эВ $\cdot$ см$^{-2} \cdot$ мин$^{-1}$	$0{,}6 \cdot 10^{11}$	$1{,}0 \cdot 10^{11}$	$1{,}9 \cdot 10^{11}$
E_φ, эВ	$15 \cdot 10^9$	$8 \cdot 10^9$	$2 \cdot 10^9$

До сих пор мы предполагали, что первоначальный спектр частиц, приходящих из космического пространства, может быть представлен в виде чисто степенного закона (40). Для обсуждения общего спектра удобнее всего разложить его на отдельные слагаемые вида (40)[144]. Можно также построить такой спектр, который представлял бы интенсивность мягкой компоненты во всей атмосфере[145]. Однако, как показал Гайтлер[146], широтный эффект для мягкой компоненты составлял бы в таком спектре менее 1% на уровне моря, тогда как на самом деле широтный эффект для мягкой компоненты, по Оже и Лепринс-Риге[147], достигает примерно 10%. Отсюда, как и выше, мы должны делать вывод, что электроны на уровне моря возникают не в каскадных процессах, а образуются из проникающей компоненты.

[143] *Johnson T. H.* Phys. Rev., 1938, **53**, 499.
[144] *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1937, **51**, 1110.
[145] *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1938, **53**, 694; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261.
[146] *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261.
[147] *Auger P., Leprince-Riguet L.* Op. cit.

Разделение различных частей космических лучей в атмосфере представлено на рис. 15. Сплошная кривая еще раз воспроизводит интенсивность по вертикали из работы Пфотцера в зависимости от высоты (рис. 11). Самая нижняя пунктирная кривая B показывает экстраполяцию доли, которую можно приписывать проникающей компоненте (§ 20), а заштрихованная область A дает теоретическое число каскадных электронов, которое мы получаем из приходящего из космоса первичного спектра (40) при показателе спада $\gamma = 1{,}9$[148]. Мы видим, что измерения в верхней атмосфере воспроизводятся этим спектром очень хорошо, но в нижней атмосфере некоторая часть C, которая по изложенным выше причинам должна иметь другое происхождение; начало ее, по-видимому, было названо Регенером и его учениками[149] «горбом» при 30 см рт. ст. Эту часть C мы вычислим в § 21.

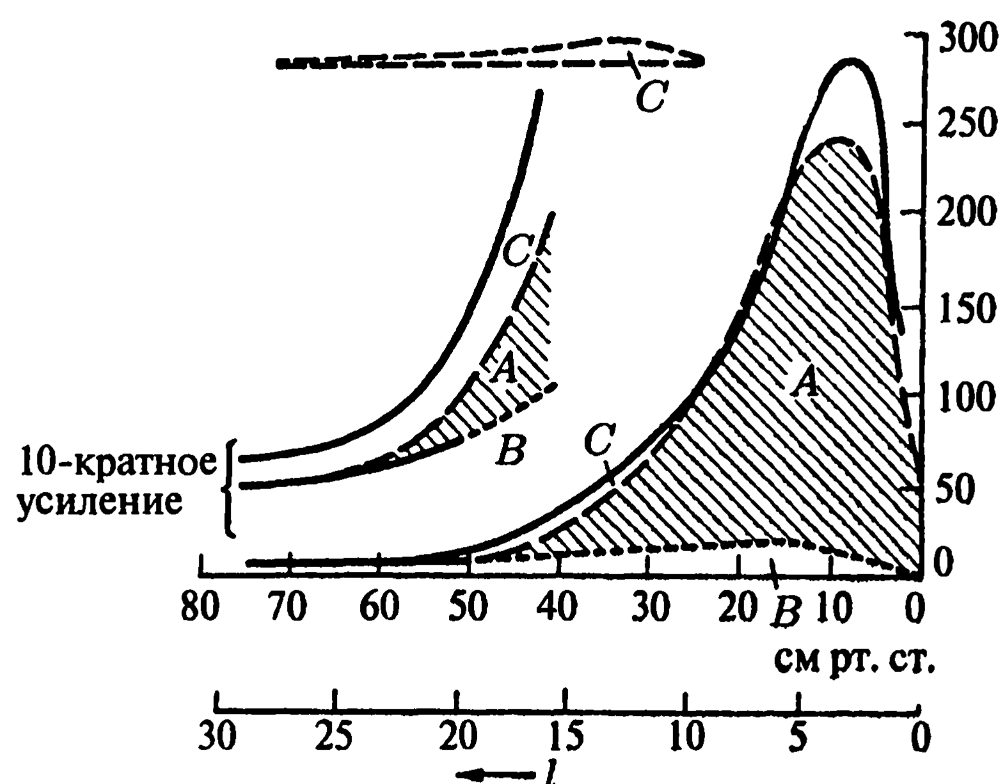


Рис. 15. Разложение космических лучей в атмосфере. ——— — измерение интенсивности по вертикали Пфотцером. — — — — экстраполяция проникающей части. A (заштриховано) — «каскадные электроны», возникающие из космических электронов путем «раздробления» в атмосфере (§ 19, $\gamma = 1{,}9$). B — тяжелые электроны, образованные компонентой A в атмосфере (§ 20). C — «электроны распада», возникающие из B (§ 21)

§ 20
Проникающая компонента

В следующем рассмотрении мы будем предполагать, что в стратосфере (точнее, при 8 мм рт. ст.) возникает спектр тяжелых электронов, в котором распределение энергии должно быть аналогично распределению энергии мягкой компоненты. Таким образом, в стратосфере должно быть следующее число тяжелых электронов с импульсом выше p:

$$F_s(p) = J_0\left(\frac{2\cdot 10^9\ \text{эВ}}{pc}\right)^{\gamma}. \qquad (43)$$

Мы вычислим теперь для такого спектра поглощение, обусловленное ионизацией и спонтанным распадом.

При вычислении *ионизации* мы будем исходить из формулы (11), согласно которой тяжелая частица с импульсом p имеет длину пробега R, определяемую соотношением

$$R(p) \simeq \frac{\mu c^2}{a}\left(\frac{2+\left(\frac{p}{\mu c}\right)^2}{\sqrt{1+\left(\frac{p}{\mu c}\right)^2}} - 2\right).$$

(Здесь $\mu \simeq 160m$ — масса тяжелого электрона, $\mu c^2 \simeq 8\cdot 10^7$ эВ.)

---

[148] *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261; *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1938, **53**, 694.

[149] *Regener E.* Op. cit.

Таблица 6

	Свинец	Вода	Воздух
a (эВ/см) =	$1{,}2 \cdot 10^7$	$2 \cdot 10^6$	$2{,}5 \cdot 10^3$

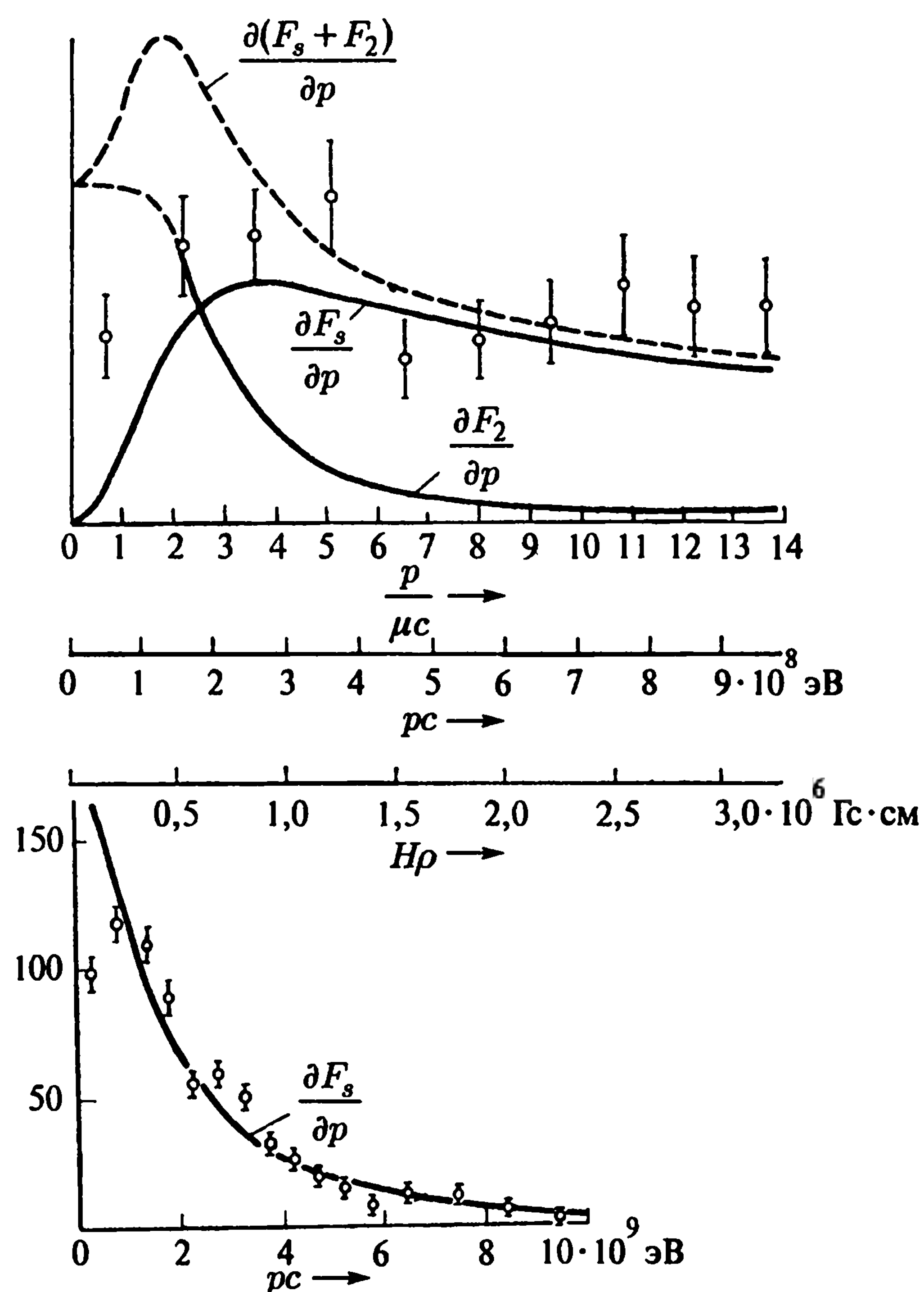


Рис. 16. Спектр на уровне моря. Абсцисса: импульс p частиц. Ордината: число $\partial F/\partial p$ частиц в интервале импульса. Кривая $\partial F_s/\partial p$: теоретический спектр тяжелых электронов. Кривая $\partial F_2/\partial p$: теоретический спектр легких электронов (§21). Кривая $\partial(F_s + F_2)/\partial p$: теоретический полный спектр. Экспериментальные точки: полный спектр по Блэккету. Верхняя часть: спектры при низких импульсах; нижняя часть: спектр проникающих частиц при высоких импульсах

Частица, которая первоначально имела импульс p_0, после прохождения через слой толщиной T будет иметь меньший импульс p, который определяется уравнением

$$T = R(p_0) - R(p),$$

следовательно, для $p_0 \geqslant 3\mu c$:

$$T = \frac{p_0 c - 2\mu c^2}{a} - R(p).$$

Из-за поглощения спектр (43) превращается на глубине T в спектр с меньшей энергией для частицы с импульсом выше p

$$F_s(p) = J_0 \left(\frac{a^{-1} \cdot 2 \cdot 10^9 \text{ эВ}}{T + R(p) + \frac{2\mu c^2}{a}} \right)^{\gamma}. \qquad (44)$$

(Вследствие условия $p_0 > 3\mu c$ эта формула справедлива для малых импульсов, начиная только от $T > \mu c^2/a \simeq 40$ см H_2O.) Этот интегральный спектр проникающих частиц при высоких импульсах ($p > 3\mu c$) спадает по формуле

$$F_s(T, p) \simeq J_0 \left(\frac{2 \cdot 10^9 \text{ эВ}}{aT + pc} \right)^{\gamma} \qquad (45)$$

($aT \simeq 2 \cdot 10^9$ эВ на уровне моря), т. е. число тяжелых электронов с импульсом выше p на глубине T равно первичному числу частиц выше импульса p, увеличенного на потерю на отрезке T.

При меньших импульсах формула (43) может быть разложена в ряд по $R(p)$, и тогда для числа частиц с импульсом ниже p мы получаем

$$J_0 \gamma \frac{(2 \cdot 10^9 \text{ эВ})^{\gamma}}{(aT + \mu c^2)^{\gamma+1}} \cdot aR(p). \qquad (46)$$

Так как с убыванием импульса длина пробега спадает очень быстро, то формула (46) прямо объясняет нам, почему так редко наблюдаются тяжелые электроны с малыми импульсами. На рис. 16 представлена теоретическая кривая дифференциального спектра при импульсах ниже $pc = 7 \cdot 10^8$ эВ.

До сих пор мы говорили о поглощении в результате ионизации, пренебрегая поглощением вследствие спонтанного распада. Это пренебрежение законно, если мы рассматриваем поглощение проникающей компоненты в воде или в твердых телах, учитывая оценку Юкавы для среднего времени жизни тяжелого электрона ($\tau \simeq 1/2 \cdot 10^{-6}$ с; ср. § 14). Например, в атмосфере спонтанный распад играет существенную роль. При этом мы можем ограничиться видом спектра при больших импульсах ($pc > 2 \cdot 10^8$ эВ), так как при малых импульсах ($pc < 2 \cdot 10^8$ эВ) спонтанный распад мало изменяет качественную формулу (46). Для изменения дифференциального спектра $f(T,p) = -\partial F_s(T,p)/\partial p$ с глубиной T мы получаем, учитывая одновременно поглощение и спонтанный распад, дифференциальное уравнение:

$$\frac{\partial f(T,p)}{\partial T} = \frac{a}{c}\frac{\partial f(T,p)}{\partial p} - \frac{b}{pT} f(T,p). \tag{47}$$

Здесь T означает глубину в см воды, измеряемую от верхней границы атмосферы; a — потери энергии на 1 см воды (см. таблицу 6). Вероятность распада на см воды становится в атмосфере тем больше, чем меньше плотность воздуха, и поэтому, если предполагать справедливость барометрической формулы, второй член в уравнении (47) содержит T в знаменателе. Множитель b связан с временем распада тяжелого электрона τ формулой

$$b = \frac{\mu}{\tau}\,\frac{\text{плотность воды } (T_{\text{уровня моря}})}{\text{плотность воздуха на уровне моря}}.$$

Решение дифференциального уравнения (47) гласит

$$f(T,p) = g(pc + aT)\left(\frac{pc}{aT}\right)^{\frac{bc}{pc+aT}}. \tag{48}$$

Здесь $g(pc + aT)$ означает произвольную функцию аргумента $pc + aT$. Она определяется условием, что для стратосферы, точнее для $T \simeq 100$, функция $f(T,p)$ должна переходить в дифференциальный спектр (43). Тем самым для дифференциального спектра в зависимости от глубины мы получаем

$$f(T,p) = \gamma J_0 \frac{(2\cdot 10^9 \text{ эВ})^\gamma c}{(pc + a(T-100))^{\gamma+1}}\left(\frac{100pc}{T(pc + a(T-100))}\right)^{\frac{bc}{pc+aT}}. \tag{49}$$

В частности, спектр на уровне моря ($T \simeq 1\,000$) приобретает вид

$$f(1\,000,p) = \gamma J_0 \frac{(2\cdot 10^9 \text{ эВ})^\gamma c}{(pc + 900a)^{\gamma+1}}\left(\frac{pc}{10(pc + 900a)}\right)^{\frac{bc}{pc+aT}}. \tag{50}$$

Второй множитель в правой части этого уравнения приводит к тому, что спектр спадает медленнее, чем спектр мягкой компоненты. В этом находит выражение то обстоятельство, что спонтанный распад на заданном участке наступает при малых импульсах чаще, чем при больших. Только при очень высоких энергиях ($pc \gg 900$ $a \simeq 1{,}8 \cdot 10^9$ эВ) крутизна спада снова определяется только показателем степени γ. Этот вывод подтверждается измерениями Блэккета[150)]. На рис. 16 (в нижней части) приведено сравнение с измерениями Блэккета теоретического спектра,

[150)] *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **159**, 1.

рассчитанного при значениях $\gamma = 1{,}87$ и $bc/1\,000\ a = 0{,}37$ с учетом обсуждаемых ниже измерений Эмерта[151]. Теория удовлетворительно воспроизводит общий вид спектра, но, конечно, не во всех его деталях.

Далее, формулы (49) и (50) согласно Куленкампфу[152] дают простое объяснение поразительному, наблюдаемому Эмертом[153] и Куленкампфом[154], факту, что поглощение в воде происходит вначале медленнее, чем в воздухе (рис. 12). При этом Эмерт варьировал толщину поглощающего слоя воздуха, изменяя в заданном месте наблюдения (приблизительно на уровне моря)[155] угол φ между падающими лучами и вертикалью при наклонном положении установки для регистрации совпадений. Затем он определял кажущуюся глубину $T' = 1\,000/\cos\varphi$. При вычислениях для этой установки следует заменить в уравнении (47) a на $a/\cos\varphi$ и b на $b/\cos\varphi$. Тогда для распределения интенсивности на уровне моря в зависимости от T' мы получаем

$$\underset{\text{воздух}}{f(T',p)} = \gamma J_0 \frac{(2\cdot 10^9\ \text{эВ})^\gamma c}{\left(pc + \frac{9}{10}aT'\right)^{\gamma+1}} \left(\frac{pc}{10\left(pc + \frac{9}{10}aT'\right)}\right)^{\frac{bc}{pc\frac{1000}{T'} + 1\,000a}}. \tag{51}$$

Для изменения интенсивности в воде, где спонтанный распад уже не играет роли, мы находим из формул (48) и (50)

$$\underset{\text{вода}}{f(T,p)} = \gamma J_0 \frac{(2\cdot 10^9\ \text{эВ})^\gamma c}{(pc + a(T-100))^{\gamma+1}} \left(\frac{pc + a(T-1\,000)}{10(pc + a(T-100))}\right)^{\frac{bc}{pc+aT}}. \tag{52}$$

Интегрируя интенсивности (51) и (52) по всему спектру, мы получаем зависимость интенсивности от глубины $\delta = bc/1\,000a$):

$$\underset{\text{воздух}}{F_s(T',0)} = \gamma J_0 \left(\frac{2\cdot 10^9\ \text{эВ}}{\frac{9}{10}aT'}\right)^\gamma \int\limits_0^\infty \frac{du}{(1+u)^{\gamma+1}} \left(\frac{u}{10(1+u)}\right)^{\frac{\delta}{1+\frac{9}{10}\delta}}, \tag{53}$$

$$\underset{\text{вода}}{F_s(T,0)} = \gamma J_0 \left(\frac{2\cdot 10^9\ \text{эВ}}{a(T-100)}\right)^\gamma \int\limits_0^\infty \frac{du}{(1+u)^{\gamma+1}} \left[\frac{1}{10(1+u)}\left(u + \frac{T-1\,000}{T-100}\right)\right]^{\frac{\delta\, 1000}{u(T-100)+T}}. \tag{54}$$

В соответствии с этими уравнениями отношение интенсивностей в воде и воздухе в очень толстых слоях будет постоянным, равным по Эмерту (см. рис. 12) 2 : 1, а спад с глубиной будет происходить по закону $T^{1-\gamma}$. Полученное Эмертом значение $\gamma \simeq 1{,}87$ хорошо согласуется со значениями, найденными для мягкой компоненты (§ 19). Из постоянного отношения можно определить величину δ, а тем самым и среднее время распада тяжелого электрона. Получаем

$$\delta \simeq 0{,}37, \quad \tau \simeq 2{,}7\cdot 10^{-6}\ \text{с}. \tag{55}$$

[151] *Ehmert A.* Zs. Phys., 1937, **106**, 751.

[152] *Kulenkampff H.* Verh. dtsch. Physik. Ges., 1938 (Breslauer Vortrag).

[153] *Ehmert A.* Zs. Phys., 1937, **106**, 751; 1937, **38**, 975.

[154] *Kulenkampff H.* Op. cit.

[155] Эмерт производил измерения частью в Штутгарте, частью на вершине Цуг, но после приведения к одной высоте они еще хорошо укладываются на одну кривую, которую без слишком большой ошибки мы можем относить к уровню моря.

Это значение примерно в 5 раз больше вычисленного из теории Юкавы (§ 14). Принимая во внимание неопределенность некоторых деталей в теории Юкавы, такое согласие можно считать вполне удовлетворительным. Следует еще подчеркнуть, что в экспериментах определяется прежде всего отношение времени распада к массе частицы Юкавы, так что изменение массы повлечет за собой соответствующее изменение экспериментального времени распада тяжелого электрона.

Наконец, мы сравним еще теоретические формулы для убывания интенсивности с глубиной (49) и (50) с измерениями Оже[156)], показывающими несколько замедленное по сравнению с измерениями Эмерта убывание интенсивности. Теоретические значения, вычисленные с использованием найденных Эмертом постоянных γ и δ, показывают, что теория воспроизводит сравнительно медленный спад интенсивности правильно, но что для более точного описания опытов Оже следует выбрать несколько меньшее значение.

Таблица 7

	T в м воды	Интенсивность по Оже	Теоретическая интенсивность
Седловина Юнгфрау	6,6	108	120
Париж	10	75	75
Подвал	30	28	17
Катакомбы	75	5	3

В предыдущем вычислении спектра проникающих частиц и их поглощения еще не были учтены процессы (§ 15), которые происходят при взаимодействии между тяжелыми частицами и атомными ядрами. Однако, рассматривая рис. 16 и 12, мы получаем впечатление, что ядерные процессы оказывают влияние на спектр проникающих частиц, по-видимому, только в некоторых деталях. Провести теоретическое рассмотрение указанных процессов, о которых говорилось в § 15, пока невозможно.

Проникающая компонента обладает на уровне моря *широтным эффектом* около 10 %[157)]. Тот факт, что широтный эффект так незначителен, можно рассматривать в качестве независимого аргумента в пользу образования проникающей компоненты из мягкого излучения. Действительно, проникающая частица теряет в атмосфере из-за ионизации всего около $2 \cdot 10^9$ эВ. Если для первичных падающих частиц мы примем энергию $2 \cdot 10^9$ эВ, то широтный эффект должен достигать по порядку величины 100 %, ибо хотя в наших широтах магнитным полем Земли были бы пропущены все частицы с энергией выше $2 \cdot 10^9$ эВ, но на экваторе лишь частицы с энергией выше 10^{10} эВ. Если же мы будем считать, что проникающая компонента образуется из мягкой компоненты в результате вторичных процессов, то следует предполагать, что наблюдаемые на поверхности Земли проникающие частицы происходят от световых квантов в стратосферном максимуме ($l \simeq 4$). Эти световые кванты, которые должны сами обладать энергией больше $2 \cdot 10^9$ эВ, в свою очередь образуются в среднем такими электронами из космического пространства, которые имеют энергию выше $2 \cdot 10^{10}$ эВ (из-за фрагментации энергии в стратосфере). Однако космическим электронам столь высокой энергии магнитное поле Земли уже не мешает (§ 12). Конечно, незначительная зависимость от магнитного поля должна быть, так как в образовании проникающей компоненты в стратосферном

---

156) *Auger P.* Züricher Vortrag in der Sammlung "Kernphysik". Berlin: Julius Springer, 1936.

157) См. *Miehlnickel E.* Op. cit.; *Street J. C., Young R. T.* Phys. Rev. 1934. **46**, 823.

максимуме участвует не одно только мягкое излучение, хотя вследствие своей большой интенсивности оно вносит, без сомнения, главный вклад.

§21

Электроны распада в нижней атмосфере

Проникающая компонента по теории Юкавы производит вторичные лучи двумя способами.

Во-первых, проникающие частицы могут спонтанно распадаться на нейтрино и электроны, которые потом дополнительно умножаются в каскадах (§ 14).

Во-вторых, при столкновении с атомными ядрами тяжелые электроны могут производить световые кванты, которые потом со своей стороны вызывают каскады (§ 15).

Электроны, образованные в ядерных процессах, должны встречаться почти пропорционально массе, а поглощаются (согласно § 11γ) также почти пропорционально массе.

Однако электроны спонтанного распада будут встречаться в воздухе значительно чаще, чем в воде или в других слоях плотного вещества, так как в воздухе участок пути, из которого могут выходить вторичные частицы, геометрически больше, чем соответствующий участок в воде, и на этом геометрически большем участке образуется больше электронов из-за спонтанного распада.

Но так как эмпирическое отношение мягкой компоненты к жесткой в воздухе на уровне моря оказывается больше, чем в твердых телах (§ 17), то мы будем предполагать, что электроны в нижней атмосфере, которые согласно § 19 возникают в результате вторичных процессов, вызываемых жесткой компонентой, образуются преимущественно при спонтанном распаде, и что электроны, рожденные в ядерных процессах, наряду с ионизационными ливнями становятся заметными только под водой или под толстыми слоями твердых тел.

Вычислим теперь спектр электронов спонтанного распада

$$F_2(T,p),$$

находящийся в равновесии со спектром проникающих частиц

$$F_s(T,p).$$

(Здесь $F(T,p)$ — число частиц с импульсом выше p на глубине T от верхней границы атмосферы.)

Электроны распада мы разделим на две группы. Во-первых, те электроны, которые образуются при распаде тяжелых электронов, остановившихся в результате ионизации (A). Во-вторых, те электроны, которые испускаются при распаде движущихся тяжелых частиц.

Электроны первой группы имеют лишь небольшую энергию, меньше $4\cdot 10^7$ эВ, так как энергия покоя тяжелой частицы, расходуемая на образование электрона и нейтрино, составляет $\mu c^2 = 8\cdot 10^7$ эВ. Эти электроны в соответствии с § 9 и 11γ имеют длину пробега около $\mu c^2/2a \simeq 20$ г/см^2. Поэтому их общее количество $\bar{A}$ приблизительно равно числу тяжелых электронов, остановившихся в последнем слое толщиной $\mu c^2/a \simeq 20$ г/см^2, т. е. согласно уравнению (46):

$$\bar{A} \simeq \frac{1}{2}\,\frac{\mu c^2}{aT} F_s(T,0). \tag{56}$$

На уровне моря это число составляет около 2 % проникающих частиц.

Большой вклад можно получить от распада движущихся тяжелых электронов. Ведь в соответствии с § 14 вероятность распада тяжелого электрона с импульсом p составляет на 1 см

$$\frac{\mu}{p\tau},$$

причем τ означает время жизни тяжелой частицы в сопутствующей системе отсчета. При распаде проникающей частицы с импульсом p образуется электрон, импульс которого в направлении движения составляет в среднем $p/2$ (§ 14). Этот электрон со своей стороны производит каскад, содержащий еще через один слой толщиной l следующее число электронов с импульсом выше $p' > E_j$

$$z\left(l, \frac{p/2}{p'}\right),$$

при этом число z означает функцию умножения (§ 10, 11), l — толщину слоя, измеряемую в соответствии с таблицей 2, в которой приведены характерные для каждого материала единицы расстояния X_0 и энергии E_j.

Итак, в равновесии с проникающим спектром $F_s(T,p)$ возникает электронный спектр (для $p'c > E_j$)

$$F_2(T,p') = \int\limits_{p=2p'}^{\infty} dp \frac{-\partial F_s(T,p)}{\partial p} \int\limits_{l=0}^{\infty} dl\, z\left(l, \frac{p/2}{p'}\right) \frac{X_0}{\tau c} \frac{\mu c}{p} + A,$$

или в соответствии с соотношением (17)

$$F_2(T,p') = \frac{\mu c}{2p'} \frac{3}{4} \frac{X_0}{\tau c} F_s(T, 2p') + A. \qquad (57)$$

Теперь мы обсудим сначала полную интенсивность, а потом спектральное распределение электронов распада $F_2(T,p')$.

Полное число электронов согласно таблице (14а) составит примерно $3F_2(T, E_j/c)$. Относительная *полная интенсивность*, т. е. отношение числа электронов к числу проникающих частиц, тогда в соответствии с формулами (56) и (57) примет вид

$$\varkappa \simeq \frac{3F_2(T, E_j/c)}{F_s(T,0)} \simeq \frac{9}{4} \frac{X_0}{\tau c} \frac{\mu c^2}{2E_j} + \frac{1}{2} \frac{\mu c^2}{aT}. \qquad (58)$$

Формула (58) после учета спектра ионизационных электронов (§ 12) правильно воспроизводит эмпирическое отношение мягкого излучения к жесткому на уровне моря ($X_0 = 275$ м),

$$\varkappa = \frac{1}{3},$$

если мы для времени распада тяжелых электронов τ будет принимать значение[158)]

$$\tau = 2 \cdot 10^{-6} \text{ с}. \qquad (59)$$

Таким образом, это значение времени распада тяжелых электронов, полученное из интенсивности мягкой компоненты в нижней атмосфере, приблизительно согласуется со значением (55), найденным Эмертом из измерений поглощения.

[158)] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

Радиационная длина X_0 в формуле (58) выражает упоминавшуюся выше зависимость интенсивности электронов распада от удельного объема равновесного материала. По формуле (58) с увеличением высоты над уровнем Земли отношение мягкого излучения распада к жесткому излучению возрастает обратно пропорционально давлению воздуха, что, по-видимому, согласуется с измерениями, представленными на рис. 10 и 15. Этот рост продолжается до наблюдавшегося Регенером и его учениками горба полной интенсивности вертикальных совпадений при 30 мм рт. ст. (рис. 11, 15), который мог бы означать повышение роли спонтанного распада в соответствии с формулой (48).

Под водой ($X_0 = 34$ см) или в других аналогичных слоях плотного вещества число электронов распада сокращается до небольшого второго члена в формуле (58); следовательно, здесь преобладают также электроны, умноженные в ионизационных ливнях Баба (§ 12), и, возможно, электроны, возникающие в ядерных процессах.

Форма дифференциального спектра электронов распада $\frac{\partial}{\partial p}F_s(T,p)$, т. е. число электронов распада в интервале энергии dp, показана на рис. 16 для уровня моря в предположении, что постоянная распада составляет $\tau = 2 \cdot 10^{-6}$ с[159]. Этот спектр при высоких энергиях спадает по степенному закону с показателем, примерно на 1 меньшим, чем в случае спектра проникающих частиц.

Отношение этих двух спектров в зависимости от импульса можно сравнивать с опытом, потому что средние потери энергии частиц различных масс определяются их импульсом p. Ведь тяжелые частицы в тонком слое теряют энергию в общем лишь незначительно, вследствие одной только ионизации, электроны же испытывают полные радиационные потери (7), относительная величина которых не зависит от энергии: 1,72 на 1 см Pb. Поэтому относительные потери энергии в тонких слоях, усредненные по всем видам частиц, на 1 см Pb определяются по формуле

$$\frac{1{,}72\,\dfrac{\partial F_2(p)}{\partial p}}{\dfrac{\partial F_2(p)}{\partial p} + \dfrac{\partial F_s(p)}{\partial p}}. \tag{60}$$

Полученное теоретическое значение относительных потерь энергии на 1 см Pb представлено на рис. 3 в зависимости от импульса. Мы видим, что оно согласуется с измерениями Блэккета[160].

Хотя в тонких слоях относительные потери энергии тяжелых электронов на ионизацию очень малы, в толстых слоях они становятся уже большими. Например, в 2 см золота должны задерживаться не только обычные электроны, но и все тяжелые электроны с импульсом ниже определенной величины, составляющей по формуле (11) $pc = 1{,}3 \cdot 10^8$ эВ. Эта величина может несколько повыситься из-за рассеяния и ядерных процессов. В измерениях Блэккета[161] через золотую пластину толщиной 2 см прошли все частицы с импульсом больше $pc = 2{,}4 \cdot 10^8$ эВ, но в пластине были задержаны все частицы с импульсом меньше $pc = 1{,}65 \cdot 10^8$ эВ. Таким образом, эти результаты, которые вначале как будто указывали на наличие индуцированного распада, качественно могут быть объединены с теорией спонтанного распада.

---

[159] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

[160] *Blackett P. M. S.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1938, **165**, 11.

[161] Ibid.

V

ОБСУЖДЕНИЕ ВТОРИЧНЫХ ПРОЦЕССОВ

§ 22

Обзор

Основываясь на спектрах, рассмотренных в предыдущих параграфах, мы должны ожидать, что будут происходить следующие процессы.

Во-первых, мягкая компонента будет образовывать каскадные ливни (§ 10, 11). Эти каскады развиваются в слоях толщиной 1–5 см Pb (рис. 8), в зависимости от того, содержат они несколько частиц или несколько тысяч. В тяжелом материале ливни будут выражены сильнее, чем в легком (§ 11γ). Значения энергии E_j и длины пробега $l = 1$, характерные для образования каскада в различных материалах, приведены в таблице 2.

Во-вторых, проникающая компонента в толстых слоях будет сопровождаться ионизационными ливнями (§ 12). Число малых ионизационных ливней ($N \lesssim$ в Pb $N \lesssim 5$ в Al) должно быть почти независимым от материала; напротив, частота больших ионизационных ливней в легких материалах должна быть меньше, чем в тяжелых[162]. Ведь, интегрируя указанную Баба частоту больших ионизационных ливней (31) по спектру проникающего излучения (45), мы получим для относительного числа $q(N) = \frac{1}{F(0)} \int\limits_0^\infty Q(N, E) - \frac{\partial F(E)}{\partial E} dE$ ливней с числом частиц больше N на каждую проникающую частицу

$$q \simeq \frac{0{,}03}{N} \qquad \text{для} \quad N \ll \frac{aT}{8E_j},$$
$$q \simeq \frac{0{,}03}{N} \left(\frac{aT}{8NE_j}\right)^\gamma \quad \text{для} \quad N \gg \frac{aT}{8E_j}. \qquad (61)$$

Имеем $aT \simeq 2 \cdot 10^9$ эВ на уровне моря, $\gamma = 1 - 2$ в соответствии с формулой (50).

В-третьих, мы будем ожидать, что космические лучи производят ливни взрывного типа (§ 15). Если даже эффективные сечения образования взрывов не очень различаются для разных частиц, на уровне моря все же будут наблюдаться преимущественно те взрывы, которые производятся проникающей компонентой, так как мягкая компонента может участвовать только в более редких взрывах из-за сильного поглощения ее в большей части в значительно более интенсивных радиационных процессах.

Поскольку взрыв происходит уже на одном отдельном атомном ядре, частота взрывов в тонких слоях будет линейно возрастать с толщиной независимо от величины ливня, в противоположность каскадам, которые вследствие участия в их образовании многих атомных ядер требуют для своего развития тем большего пути, чем больше ливень (27). При более толстых слоях интенсивность взрывов будет лишь медленно убывать с толщиной слоя в соответствии с поглощением возбуждающей проникающей компоненты, в то время как интенсивность каскадов очень быстро спадает до нуля (рис. 8). Это «насыщение» взрывных процессов наступит при такой толщине слоя, которая отвечает длине пробега частиц, образуемых при взрыве (§ 15). Наконец, к ливням, которые образуются на ядре, часто присоединяются ядерные процессы.

---

[162] См. *Bhabha H. J.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **164**, 257.

§ 23

Малые ливни[163)]

А. Прямое решение вопроса о том, происходят ли в действительности обсуждаемые здесь процессы ливнеобразования, в последние годы стало возможным благодаря съемкам в камере Вильсона, при которых лучи пронизывали много поглощающих пластин[164)].

Рис. 17, который был любезно предоставлен нам Фасселлом[165)], показывает типичную картину каскада: упомянутый выше проникающий луч увеличивает число своих ионизирующих частиц в четыре раза на первой пластине толщиной 6 мм и увеличивает его еще в четыре раза на второй пластине той же толщины. Эти 16 лучей затем лишь немного рассеиваются на третьем тонком слое толщиной 0,7 мм. Такое пошаговое умножение числа лучей соответствует каскадной теории, если мы припишем первичному лучу энергию около $2 \cdot 10^9$ эВ (рис. 7).

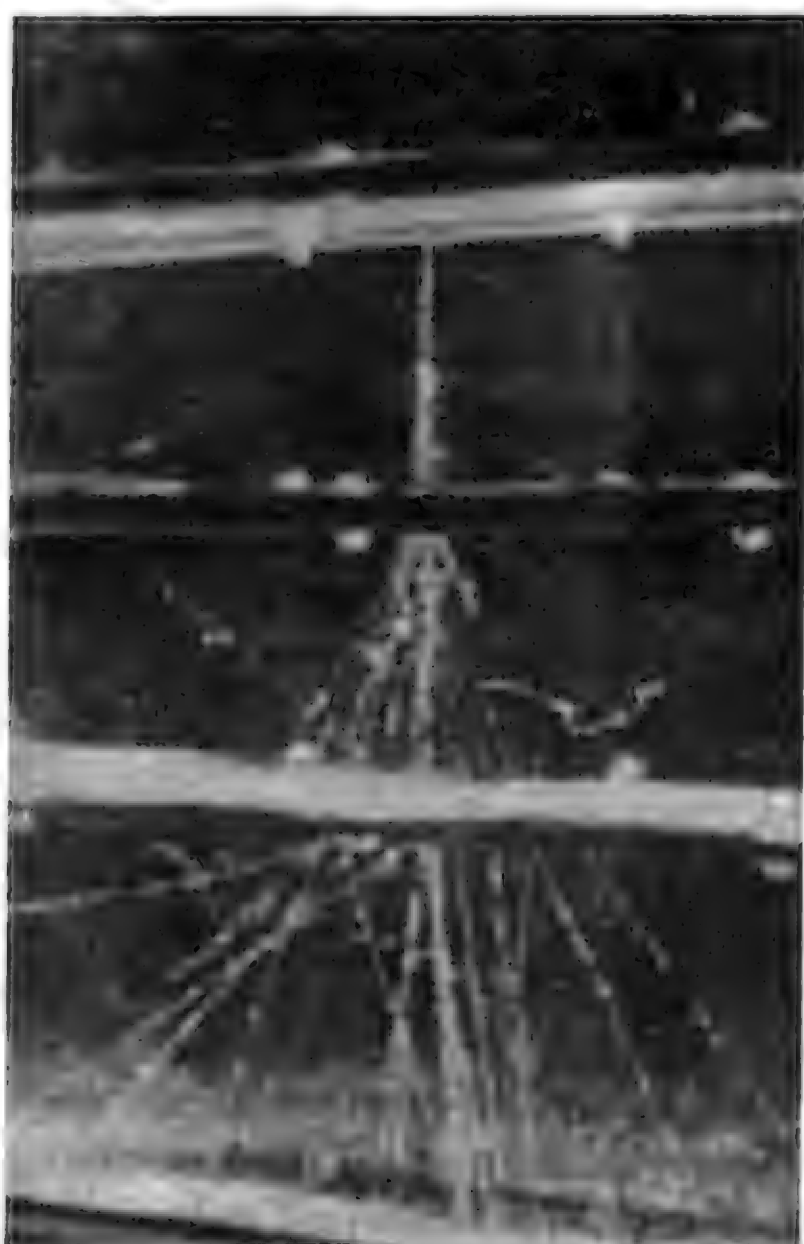


Рис. 17. Каскадный ливень на снимке Фасселла[166)]. Толщина пластин сверху вниз: 6,3 мм Pb, 6,3 мм Pb, 0,7 мм Pb



Рис. 18. Взрывной ливень на снимке Фасселла[167)]. Поглотитель тот же, что на рис. 17

Следующий снимок Фасселла (рис. 18) показывает типичный взрыв. Взрывной характер следует здесь из того факта, что возбуждающий луч пронизывает первую свинцовую пластину (толщиной 6 мм) без взаимодействий и только во второй

[163)] См. *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.; *Miehlnickel E.* Op. cit.; *Geiger H.* Zs. Phys., 1937, **38**, 936.

[164)] *Fussell L.* Phys. Rev., 1936, **51**, 1005.

[165)] Мы хотели бы сердечно поблагодарить Фасселла за любезное предоставление снимков 17, 18, 18а и за разрешение их опубликовать.

[166)] Снимок ранее не публиковался. См. *Fussell L.* Op. cit.

[167)] Снимок ранее не публиковался. См. *Fussell L.* Op. cit.

пластине (6 мм) производит целый ливень. Взрывной характер подтверждается далее тем обстоятельством, что ливень содержит некоторые сильно ионизирующие следы. Эти сильно ионизирующие частицы могут быть или протонами, которые выбрасываются из ядра при его испарении, вызванном на поверхности вторичными частицами ливня, или же они могут быть медленными тяжелыми электронами, образующимися непосредственно во взрывном ливне. На вопрос о том, весь ли ливень состоит из тяжелых электронов, рис. 18 ответить не может. Для ответа



Рис. 18.а. Взрывной ливень на снимке Фасселла[168]. Толщина свинцовых пластин сверху вниз: 0,7 мм, 6,3 мм, 6,3 мм. Следы траекторий были подретушированы Фасселлом, чтобы сделать их более отчетливыми

[168] Снимок ранее не публиковался. См. *Fussell L.* Op. cit.

на этот вопрос мы должны ждать дальнейших снимков, на которых все ливневые частицы пройдут еще через одну пластину толщиной несколько миллиметров свинца. При этом будет видно, производят ли ливневые частицы новые каскады как электроны, или же они проходят через поглотитель без взаимодействий, как это следует ожидать для тяжелых электронов.

В пользу последнего предположения говорит снимок Фасселла (18.а). Ливень на рис. 18.а снова должен быть взрывом, потому что он содержит несколько сильно ионизирующих следов и потому что он возникает в свинцовой пластине толщиной всего 0,7 мм, в которой образование каскадов в высшей степени невероятно. Однако ливневые частицы, по-видимому, в большинстве представляют собой тяжелые электроны, потому что большая часть их может проникать через следующие пластины толщиной 6 мм, из которых только в одной образуется каскад.

Среди 900 снимков каскадного типа (рис. 17) Фасселл[169)] нашел три снимка типа взрыва (рис. 18). Трампи[170)] также установил преобладание каскадов. Это показывает, что большая часть меньших ливней из Pb образована каскадами; это понятно, принимая во внимание, что каждый электрон и световой квант вызывает каскад в слое свинца толщиной несколько миллиметров, а проникающие частицы производят взрывы лишь с очень малой вероятностью.

Б. Статистическое изучение меньших ливней возможно на основе совпадений Росси[171)], наблюдаемых на установке из большого количества расположенных в треугольнике счетчиков, которые регистрируют совпадения при попадании в них лучей из одного ливня. Частота совпадений Росси в зависимости от толщины ливнеобразующего слоя показана на рис. 19 по измерениям Моргана и Нильсона в Pb и Fe[172)]. Она сначала возрастает до максимума при 1,5 см Pb ($l = 4$) или 4,5 см Fe ($l = 3$), а потом снижается до некоторого уровня, очень слабо изменяющегося при дальнейшем увеличении толщины слоя.

Теперь мы покажем, что совпадения Росси получаются в максимуме каскадов и что при более толстых слоях они вызываются главным образом ионизационными ливнями Баба и, по всей вероятности, только в очень малой части образуются в процессах, родственных взрывам.

Экспериментальное отделение чистых каскадных ливней от ливней, содержащих сильные проникающие вторичные частицы, было проведено Швеглером[173)]. Швеглер сравнил число обычных совпадений Росси (верхняя кривая на рис. 20) с сокращенным числом совпадений Росси, которое он получал, вставляя между счетчиками пластину из свинца толщиной 10 см (нижняя кривая на рис. 20). При этом оказалось, что все совпадения под толстыми слоями сохраняются и при наличии свинцовой пластины 10 см толщиной. Поскольку зависимость совпадений при наличии 10-сантиметровой пластины из свинца от толщины возбуждающего слоя (рис. 20) получается по характеру такой же, как для ионизационных ливней Баба, мы будем приписывать преобладающую часть совпадений Росси под толстыми слоями ионизационным ливням, образуемым проникающим излучением. Правда, как показывают новейшие измере-

---

169) *Fussell L.* Op. cit.

170) *Trumpy.* Norske Vidensk. Selsk., 1938, **37**, 137.

171) *Rossi B.* Zs. Phys., 1933, **82**, 151; 1932, **33**, 304; ср. *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42; *Miehlnickel E.* Op. cit.

172) *Morgan J. E., Nielsen W. M.* Phys. Rev., 1937, **52**, 564.

173) *Schwegler A.* Zs. Phys., 1935, **96**, 62.

ния Шмайсера и Боте[174], которые будут обсуждаться в § 24, некоторую часть совпадений Росси под более толстыми слоями мы должны отнести к другим процессам.

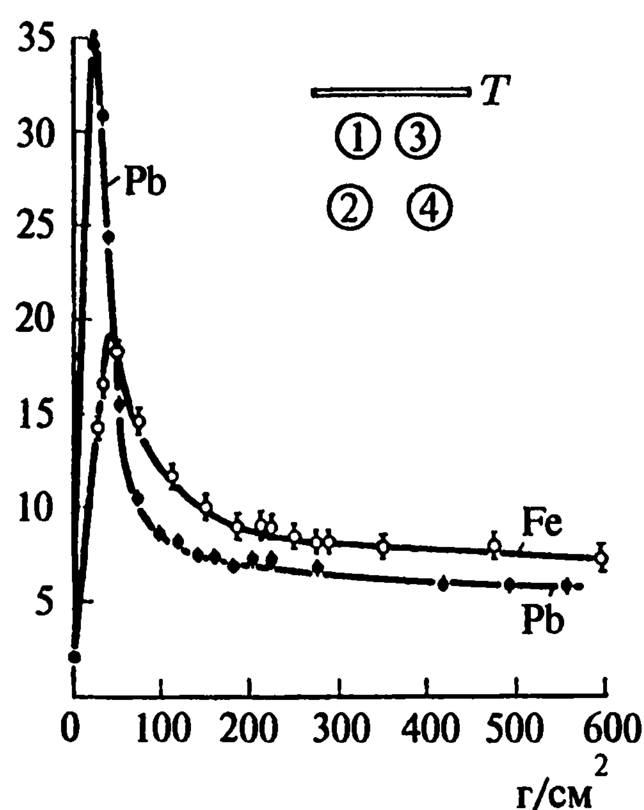


Рис. 19. Совпадения Росси по Моргану и Нильсену[175]. Абсцисса: толщина возбуждающего слоя в г/см^2. Ордината: число совпадений в час. ●●● — свинец, ♁ — железо

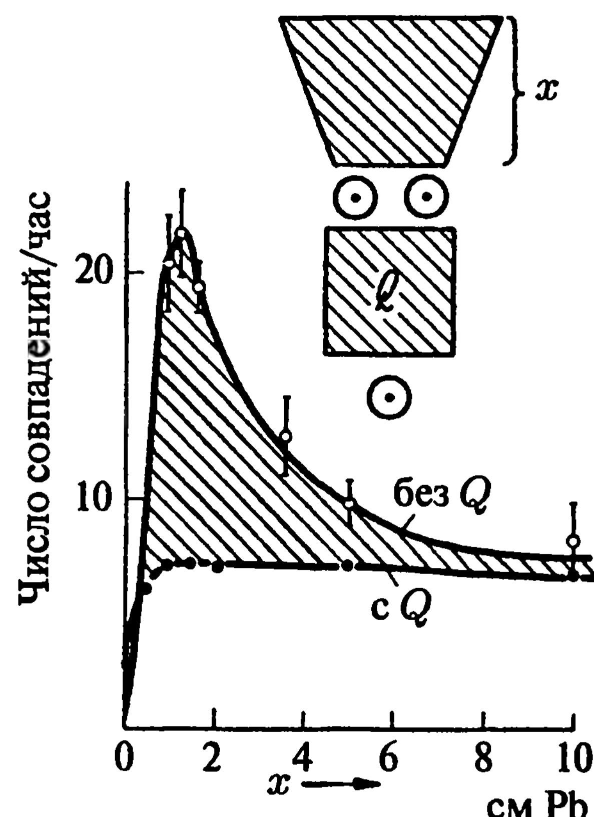


Рис. 20. Эмпирическое отделение каскадных ливней от ливней других типов по Швеглеру[176]. Абсцисса: толщина слоя свинца на счетчиках. Ордината: частота совпадений Росси. Верхняя кривая: без свинцового поглотителя Q; нижняя кривая: с поглотителем из свинца Q толщиной 10 см между счетчиками. Заштрихована доля каскадных ливней

Разность между измерениями Швеглера в отсутствие свинцовой пластины и при ее наличии (заштрихованная область на рис. 20), т. е. преобладающая часть совпадений в слоях толщиной меньше 5 см Pb, по своей форме соответствует каскадным ливням (рис. 8), что приобретает высокую степень достоверности по следующим причинам.

а) Зависимость от массы отклоняется от пропорциональности в соответствии с таблицей 2. Это обстоятельство еще до каскадной теории было подчеркнуто Гейгером и Фюнфером в качестве довода в пользу возникновения этих линий в результате тормозного излучения и образования пар[177].

б) Ливни из свинца больше, чем линии из алюминия, как показывают исследования Гейгера[178] с большим числом счетчиков. Это может быть понято с точки зрения каскадной теории, так как умножение происходит в свинце при энергиях ниже 10^7 эВ, тогда как в алюминии оно прекращается уже при $6 \cdot 10^7$ эВ из-за ионизации (таблица 2).

в) По той же причине становится понятным результат измерений поглощения Ху Чиен Шаном[179], показывающих, что ливневые частицы Al обладают более высокой энергией, чем из свинца.

---

[174] *Schmeisser K., Bothe W.* Naturwiss., 1937, **25**, 833; *Schmeisser K.* Ann. Phys., 1938, **32**, 161.

[175] *Morgan J. E., Nielsen W. M.* Phys. Rev., 1937, **52**, 564.

[176] *Schwegler A.* Zs. Phys., 1935, **96**, 62.

[177] *Geiger H., Fünfer E.* Op. cit.; *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.

[178] *Geiger H.* Zs. Phys., 1937, **38**, 936.

[179] *Hu Chien Shan.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 95.

Определить количественно на опыте легко вычисляемую теоретически частоту ливней $H(N, l)$ с числом частиц более чем $N = 2, 3, 4\ldots$ в зависимости от толщины слоя l (рис. 8, § 11γ) для малых величин ливней $N < 10$ сегодня еще невозможно. Пока количественно могут быть определены следующие величины.

Частота n-кратных совпадений в различных установках. Из нее можно определить «вероятность срабатывания»[180] счетчика в установке некоторой заданной конфигурации, т. е. относительное число случаев, в которых этот счетчик срабатывает одновременно с группой других счетчиков. Зная вероятность срабатывания и частоту совпадений, можно делать выводы о средней величине ливней и о частоте среднего ливня, величина которого изменяется с толщиной слоя. Арли[181] рассмотрел опыты с совпадениями в предположении, что частота двукратных совпадений равна частоте ливней, содержащих более двух частиц. Он получил в общем и целом согласие с каскадной теорией, аналогичное показанному на рис. 20. Более точное рассмотрение стало возможным на основе введенного Гейгером понятия вероятности.

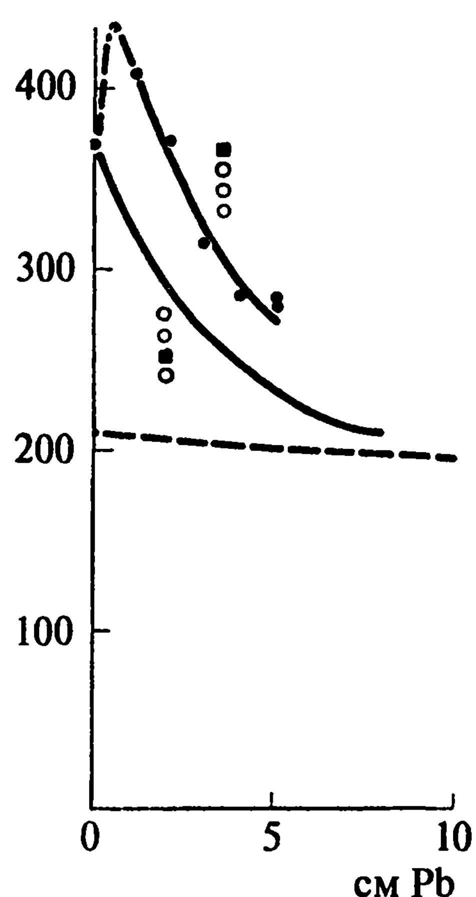


Рис. 21. Измерения совпадений Оже, Ле-принс-Риге и Эренфеста[182] на перевале Юнгфрау. Абсцисса: толщина поглотителя. Ордината: число совпадений. Нижняя кривая дает совпадения, при которых поглотитель был помещен между счетчиками, так что могли действовать только заряженные частицы. При снятии верхней кривой слой поглотителя был расположен над счетчиками, так что и световые кванты с энергией выше $E_j \simeq 10^7$ эВ превращались в электроны и давали совпадения (см. рис. 9). — — — — экстраполированная доля жесткой компоненты

Штулингер[183] измерил пропорциональным счетчиком *распределение ливней*, т. е. относительное число $H(N, l)$ ливней более, чем из $1, 2, \ldots N$ частиц в слое толщиной 1,5 см Pb ($l = 4$). Его результаты для $1 < N < 100$ можно представить приближенной формулой $H(N, 4) = \text{const}/N$. Правда, их еще нельзя сравнивать прямо с теорией § 11γ, 19, поскольку мы не знаем геометрические условия, определяющие угол расхождения лучей. Теоретическое распределение ливней $H_m(N)$, которое должно существовать при среднем угле расхождения в равновесном слое $l_m \simeq 3 \lg N + 2{,}7$ (§ 11γ), показано на рис. 24, который подробнее будет рассмотрен в следующих параграфах.

Число *световых квантов*, способных образовать ливни, т. е. число световых квантов с энергией выше границы ионизации E_j (таблица 2), содержащихся в мягком излучении, согласно каскадной теории будет таким же, как число электронов. Это находится в согласии с измерениями Оже, Лепринс-Риге и Эренфеста[184] (рис. 21), в соответствии с которыми кривая поглощения для прямолинейных совпадений мягких

[180] *Geiger H.* Zs. Phys., 1937, **38**, 936; *Geiger H., Zeiller O.* Zs. Phys., 1935, **97**, 300.
[181] *Arley N.* Op. cit.
[182] *Auger P., Leprince-Riguet L., Ehrenfest P.* Op. cit.
[183] *Stuhlinger E.* Op. cit.
[184] *Auger P., Leprince-Riguet L., Ehrenfest P.* Op. cit.

лучей повышается на порядок своей собственной величины, когда поглотитель перемещается из положения между счетчиками в положение над счетчиками, в котором он превращает в электроны все световые кванты с энергией больше E_j. Напротив, согласно теории излучения число световых квантов с энергией ниже границы ионизации должно быть значительно больше, чем число электронов такой же энергии. Ибо электроны с энергией $E < E_j$ тормозятся вследствие ионизации; световые же кванты теряют энергию при значительно меньших энергиях порядка 10^6 эВ вследствие фотоэффекта и эффекта Комптона. Таким образом, в то время как дифференциальный спектр электронов $\partial F(E)/\partial E$ мягкой компоненты (рис. 16) (или вторичных лучей ливня) ниже границы ионизации E_j почти не зависит от энергии, соответствующий спектр световых квантов при малых энергиях $k < E_j$ будет сначала еще возрастать как dk/k (§ 7). Следовательно, частицы в ливне будут сопровождаться большим количеством световых квантов низкой энергии, которое может во много раз превосходить число электронов. Согласно измерениям совпадений Гейгера и Цейлера[185] это число световых электронов примерно в 50 раз больше числа электронов. Эффекты отражения лучей, измеренные Гейгером и его сотрудниками[186], были объяснены этими авторами также действием световых квантов низкой энергии.

§ 24

Большие ливни[187]

А. Информацию о больших ливнях мы можем получить, рассматривая толчки Гофмана, т. е. внезапное образование большого количества ионов, которые наблюдаются в ионизационной камере и которые имеют вид пучков из 10–1 000 слабо ионизирующих частиц, иногда наблюдавшихся ранее также на снимках в камере Вильсона (рис. 22). Правда, неточность при расчете размера толчков N по ионизации и частоты ливней по снимкам их в камере Вильсона пока еще довольно велика; однако эти расчеты, в которых величина и частота ливней определяется с точностью до множителя, равного 2 или 3, в пределах ошибок все-таки позволяют делать некоторые утверждения о статистике больших ливней. Используемые здесь результаты пересчета эмпирических величин в соответствующие теоретические сведены в следующую таблицу.



Рис. 22. Снимок ливня взрывного типа приблизительно более чем из 300 частиц с полной энергией более чем $1{,}5 \cdot 10^9$ эВ по Андерсону и Неддермейеру[188]

[185] *Geiger H., Zeiller O.* Zs. Phys., 1938, **108**, 212.

[186] См. *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.

[187] См. *Miehlnickel E.* Op. cit.; *Steinke E. G.* Op. cit.

[188] *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Phys. Rev., 1936, **50**, 263.

Таблица 8

Автор	Эффективная площадь, см^2	Число частиц на 10^6 пар ионов
Бёггильд	700	40
Ни	1 600	50
Мессершмидт	500	20
Янг и Стрит	50	–
Кармайкл	2 000	–

При этом предполагалось, что ионизация составляет 70 пар ионов на 1 см, а эффективная площадь защитного панциря приравнивалась во всех случаях поперечному сечению камеры.

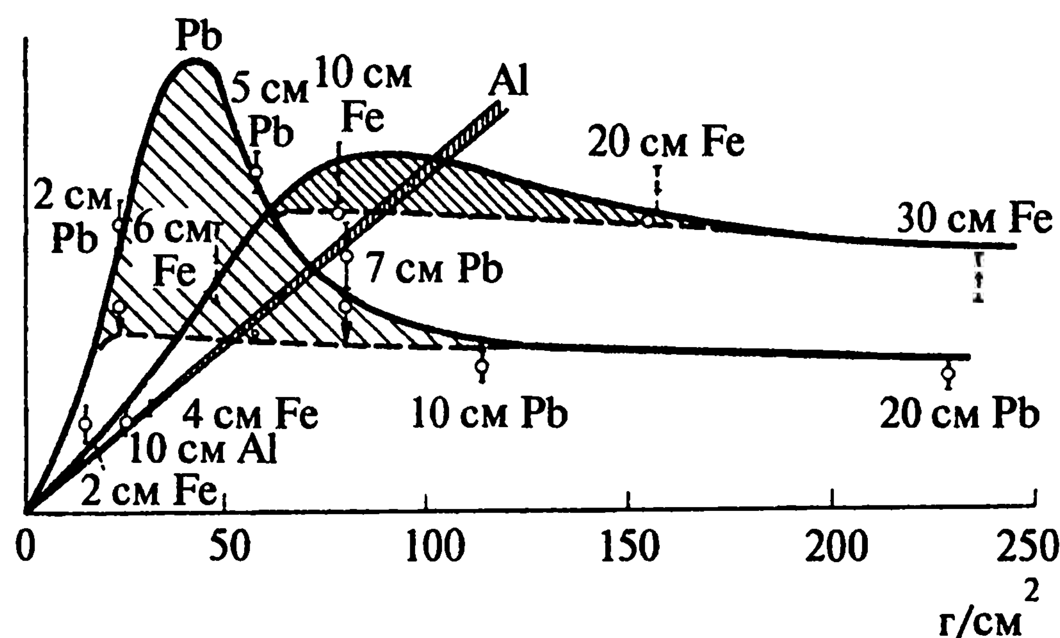


Рис. 23. Кривые возбуждения толчков по Ни. Абсцисса: толщина возбуждающего слоя в г/см^2. Ордината: частота толчков более чем из $N = 200$ частиц. ⸸ — измерения Ни в Pb, Fe, Al. Заштриховано: теоретическая доля каскадных ливней по рис. 8, § 11. ◦◦◦ — некаскадная часть, полученная вычитанием кривых

На рис. 23 изображена полученная Ни[189] кривая возбуждения для толчков в различных материалах с числом частиц более 200, т. е. частота толчков с числом частиц больше $N = 200$ в зависимости от толщины панциря. Кривая по своему виду аналогична соответствующей кривой для меньших ливней, регистрируемых в совпадениях Росси (рис. 19, 20); с величиной толчков N ее форма почти не изменяется[190]. Далее мы покажем, что на рис. 22 заштрихованная область должна быть отнесена к доле толчков в максимуме кривой каскадов и что остальные толчки и, значит, прежде всего толчки под более толстыми и под более тонкими слоями, образованы взрывами, если только прежние измерения подтверждаются теперь в более чистых условиях[191]. Разделение двух видов толчков на рис. 22 было произведено так, что теоретическая частота больших каскадов (рис. 8; § 11γ) была отложена от каждой измеренной точки вниз, причем неопределенный общий множитель, показывающий интенсивность, был выбран соответствующим образом.

За каскадную природу толчков в максимуме кривой возбуждения (заштрихованные области на рис. 23) говорят следующие доводы:

а) Положение максимумов l_m воспроизводится каскадной теорией примерно правильно, как показывает следующая таблица.

[189] *Nie H.* Zs. Phys., 1936, **99**, 453; 1936, **79**, 776.

[190] *Messerschmidt W.* Zs. Phys., 1936, **103**, 27; *Carmichael H.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1936, **154**, 223; *Bőggild J. K.* Diss. Kopenhagen, 1937; *Young R. T., Street J. C.* Phys. Rev., 1934, **46**, 823; *Young R. T. jr.* Phys. Rev., 1937, **52**, 559.

[191] *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

Таблица 9

Положение максимума кривой возбуждения толчков

Величина толчков	$N=$	10	20	30	40	80	200	300	400
Янг и Стрит[192] Pb	$l_m =$	4 ± 2	5 ± 2	$5{,}5 \pm 2$					
Бёггильд[193] Fe	$l_m =$		$3 \pm 1{,}5$		$4 \pm 1{,}5$	$5 \pm 1{,}5$			
Ни[194] Pb	$l_m =$						$7{,}5 \pm 4$	9 ± 4	10 ± 4
Ни[195] Pb	$l_m =$						8 ± 2	9 ± 2	10 ± 2
Теория (§ 11γ) $2{,}7 + 3 \lg N$	$N=$	5,7	6,6	7,2	7,5	8,5	9,6	10,2	10,5

Расхождение между теорией и экспериментом больше для измерений Бёггильда, как и следовало ожидать, учитывая неточности в пересчетных множителях (таблица 8).

б) Ширина максимумов, которая может быть проверена прежде всего в выполненных Янгом и Стритом[196] измерениях толчков, воспроизводится правильно. В частности, для Fe она воспроизводится правильно в том случае, если теоретически предсказываемую долю толчков, незначительную по сравнению с долей для свинца, мы будем приписывать каскадам (рис. 23).

в) Отношение интенсивностей в максимумах кривой возбуждения толчков воспроизводится, по-видимому, правильно электронным спектром, предсказываемым теоретически в соответствии с § 21 и 19.

Это следует, в частности, из рис. 24, на котором изображены экспериментальные значения частоты каскадных толчков $H_m(N)$ в максимуме кривой возбуждения для Pb (§ 11γ), т. е. в максимуме заштрихованных площадей на рис. 23, как функции величины толчка N. В соответствии с формулой (15) эта функция должна давать прямо долю спектра электронов, производящих толчки, так как в рассматриваемом случае частота толчков с числом частиц больше N равна частоте попадания на слой свинца для электронов с энергией больше $E = (8N)^{1{,}07} E_j$ эВ. Соответственно, шкала энергии приведена на рис. 24 рядом со шкалой числа частиц.

На рисунке мы видим, что участки кривой, на которых представлены полученные при измерениях в различных ионизационных камерах величины ливней[197], можно объединить в одну кривую, изображающую спектр электронов, падающих на поверхность Земли, если только будут точно известны абсолютные значения частоты толчков. Этот эмпирический спектр электронов, по-видимому, не очень сильно отличается от теоретического спектра электронов, рассмотренного в § 21 и 19. Теоретический спектр содержит две части: во-первых, спектр электронов распада (§ 21), который преобладает при низких энергиях и который обозначен на рис. 24 крестиками; во-вторых, спектр каскадных электронов (§ 19), который на уровне моря становится заметным только при высоких энергиях и который

192) *Young R. T., Street J. C.* Op. cit.; *Young R. T. jr.* Op. cit.

193) *Böggild J. K.* Op. cit.

194) *Nie H.* Zs. Phys., 1936, **99**, 453.

195) Ibid.

196) *Young R. T., Street J. C.* Op. cit.

197) *Young R. T. jr.* Op. cit.; *Messerschmidt W.* Op. cit.; *Carmichael H.* Op. cit.; *Barnóthy J., Forró M.* Zs. Phys., 1937, **104**, 744; *Nie H.* Zs. Phys., 1936, **99**, 453; 1936, **79**, 776.

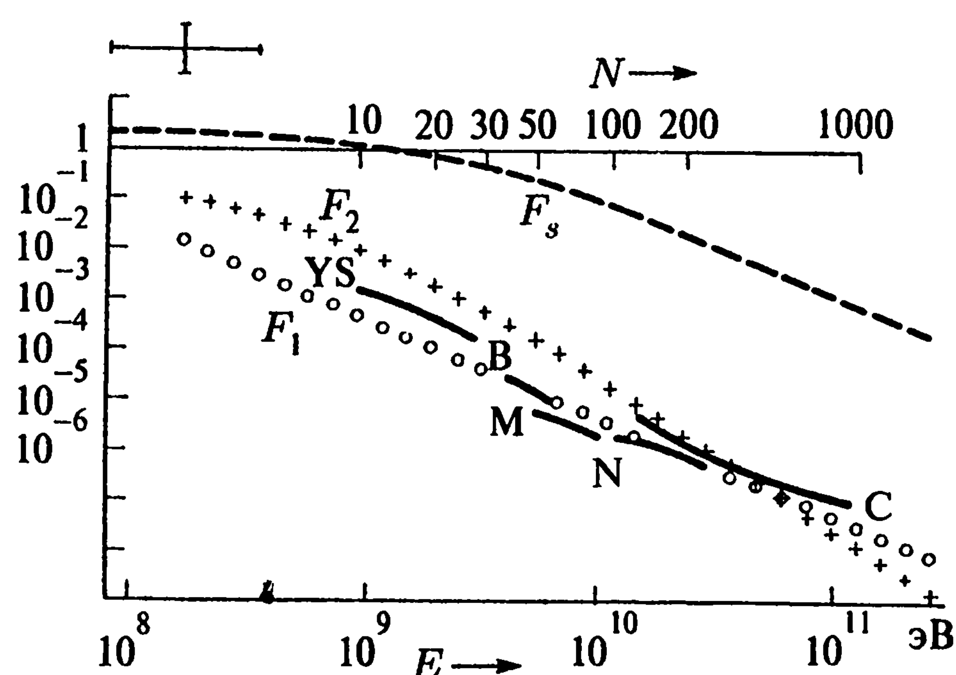


Рис. 24. Спектр и частота каскадов. Абсцисса: импульс p частиц в эВ (масштаб логарифмический). Ордината: число частиц F с импульсом больше p в мин/см^2 на уровне моря (масштаб логарифмический). ○○○ — F_1: каскадные электроны (§ 19, $\gamma = 1{,}85$). – – – – F_s: проникающие электроны (§ 20). + + + — F_2: электроны распада (§ 21). Поскольку каждый электрон с энергией E производит в свинце ливень, величина которого в максимуме кривой возбуждения l_m (§ 11γ) определяется формулой $N = \frac{1}{8}\left(\frac{E}{10^7\ \text{эВ}}\right)^{0{,}93}$, рисунок можно истолковать также следующим образом. Абсцисса: величина каскадных ливней N. Ордината: частота H_m каскадных ливней более чем из N частиц в максимуме кривой возбуждения для свинца в мин/см^2. Сплошные части кривых изображают экспериментальные данные для толчков, взятые из работ: YS — Янг и Стрит, B — Бёггильд, M — Мессершмидт, N — Ни, C — Кармайкл. ⊢┼⊣ — экспериментальные погрешности абсолютной частоты и величины толчков

обозначен на рис. 24 кружками. Однако для окончательного разделения этих спектров мы должны подождать до тех пор, пока будут получены более точные кривые абсолютных значений частоты каскадных ливней.

г) Сильная эмпирическая высотная зависимость толчков Гофмана в максимуме кривой возбуждения для свинца[198] может быть объяснена с помощью спектров электронов, возбуждающих каскады, в то время как незначительная высотная зависимость толчков в толстых слоях[199] указывает на возбуждение этих толчков проникающей компонентой.

Прирост частоты толчков в максимуме толщины ($\sim 2-4$ см Pb) при разности высот от 76 до 45 см рт. ст. приведен в таблице 10.

Таблица 10

	Вудворд[200]	Янг и Стрит[201]	Монтгомери[202]
Величина толчков N	< 10	10 20 30	40
Коэффициент крутизны	8,5	10 17 22	26

Этот прирост, тем больший, чем больше толчки, объясняется взаимным влиянием электронных спектров § 21 и 19. Ибо при малых энергиях и, стало

[198] *Young R. T., Street J. C.* Op. cit.; *Montgomery C. G., Montgomery C. C.* Phys. Rev., 1935, **48**, 786; *Swann.* Phys. Rev., 1935, **47**, 811.

[199] *Young R. T., Street J. C.* Phys. Rev., 1934, **46**, 823; см. *Miehlnickel E.* Op. cit.

[200] *Street J. C., Woodward R. H., Stevenson E. C.* Op. cit.

[201] *Young R. T. jr.* Op. cit.; *Young R. T., Street J. C.* Op. cit.

[202] *Montgomery C. G., Montgomery C. C.* Phys. Rev., 1935, **48**, 786.

быть, при малых каскадных толчках на уровне моря преобладает спектр электронов распада (+ + + на рис. 24), медленно нарастающий с высотой (21). При больших же энергиях, а следовательно, и при больших каскадных толчках преобладает каскадный спектр (о о о на рис. 24), возрастающий с высотой очень быстро (формула (41), § 19).

Таблица 11

Коэффициент возрастания при указанной разности высот ($l = 12$)	20	40	63
Для постоянной спада (§ 19) $\gamma =$	1,5	1,7	1,9

Конечно, на большой высоте над поверхностью Земли каскадный спектр скоро начинает преобладать при всех энергиях. Дальнейшие измерения высотной зависимости больших толчков Гофмана могут установить более точно форму этого спектра электронов, которая была определена в § 19 и 20 лишь косвенно и приближенно ($\gamma = 1{,}8$–$1{,}9$).

Высотная зависимость каскадных толчков Гофмана (таблица 10) дает еще один независимый довод в пользу образования наблюдаемых на уровне моря электронов из проникающей компоненты. Ведь если мы захотим построить спектр электронов космического пространства, который потом преобразуется в атмосфере в каскадных ливнях, а в нижней атмосфере производит каскадные толчки Гофмана, то нам пришлось бы приписывать этому спектру более сильную степень спада при высоких энергиях, чем при низких энергиях, для того, чтобы число больших каскадных толчков возрастало с высотой сильнее, чем число малых толчков (§ 19). Если же мы хотим построить спектр таким образом, чтобы он давал число электронов и в верхней, и в нижней атмосфере, то нам пришлось бы приписывать ему более слабое спадание при высоких энергиях, чем при низких[203] (§ 19). Однако оба эти условия не могут быть удовлетворены одновременно, т. е. мягкое излучение в нижней атмосфере должно образовываться из проникающей компоненты.

Изменение интенсивности толчков с высотой соответствует ее изменению с глубиной. В подвале, по Бёггильду[204], резкий каскадный максимум приглушается больше, чем интенсивность при больших толщинах слоя. По Вейшеделю[205], в Боденском озере частота толчков, которую можно относить к толстым слоям, спадает с глубиной аналогично проникающей компоненте. Соответствующие опыты проводились также с совпадениями Росси[206], так что мы можем предполагать, что максимумы кривой возбуждения и для толчков, и для совпадений Росси обусловлены мягкой компонентой. Тем самым теория излучения (§ 7) подтверждается вплоть до энергии 10^{11} эВ.

Б. Итак, если одна часть толчков в максимуме кривой возбуждения имеет все свойства, характерные для каскадов, то вторая часть, относящаяся к толстым слоям, должна быть приписана другим причинам.

д) За это говорит, во-первых, то обстоятельство, что по каскадной теории частота толчков в толстых слоях быстро убывает до нуля (рис. 8), в то время

---

203) *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. Lond., 1937, **161**, 261; *Nordheim L. W.* Phys. Rev., 1937, **51**, 1110.
204) *Böggild J. K.* Op. cit.
205) *Weischedel F.* Zs. Phys., 1935, **36**, 796.
206) См. *Auger P.* Züricher Vortrag in der Sammlung “Kernphysik”. Berlin: Julius Springer, 1936.

как в действительности толчки в толстых слоях происходят с некоторой конечной частотой, которая для средних толчков в свинце составляет половину максимальной (рис. 23).

е) Однако самый сильный аргумент в пользу некаскадной природы большей части толчков дает нам зависимость от материала: в противоположность предсказаниям каскадной теории, согласно которым частоты соответствующих толчков для Pb : Fe : Al должны относиться как $1 : 3^{-2} : 6^{-2}$ (§ 11γ, $\gamma \simeq 2$), на самом деле интенсивность толчков под толстыми слоями больше, наоборот, в легких, чем в тяжелых материалах (рис. 23). Следовательно, если мы допустим, что в максимуме кривой возбуждения для свинца 50 % всех толчков относится к каскадам, то в максимуме для железа мы сможем объяснить каскадными процессами только 6 % толчков, а в максимуме для алюминия — лишь около 1,5 %. Поэтому толчки в более толстых и более тонких слоях и, прежде всего, в преобладающей части толчков в легких материалах должны иметь другое происхождение. Только что рассмотренная зависимость толчков Гофмана от материала исключает также возможность объяснения толчков в толстых слоях ионизационными ливнями Баба. Ведь большие ионизационные ливни в тяжелом материале должны происходить чаще, чем в легком, примерно в отношении атомных номеров (61), тогда как в действительности толчки ведут себя скорее в обратном отношении (рис. 23).

ж) Для решения вопроса о природе некаскадных толчков можно исходить из процессов в тонких слоях. На рис. 25 приведены эмпирические значения частоты толчков более чем из N частиц за минуту и килограмм в зависимости от величины толчка N в тонких слоях. Тот факт, что для слоев различной толщины эмпирические

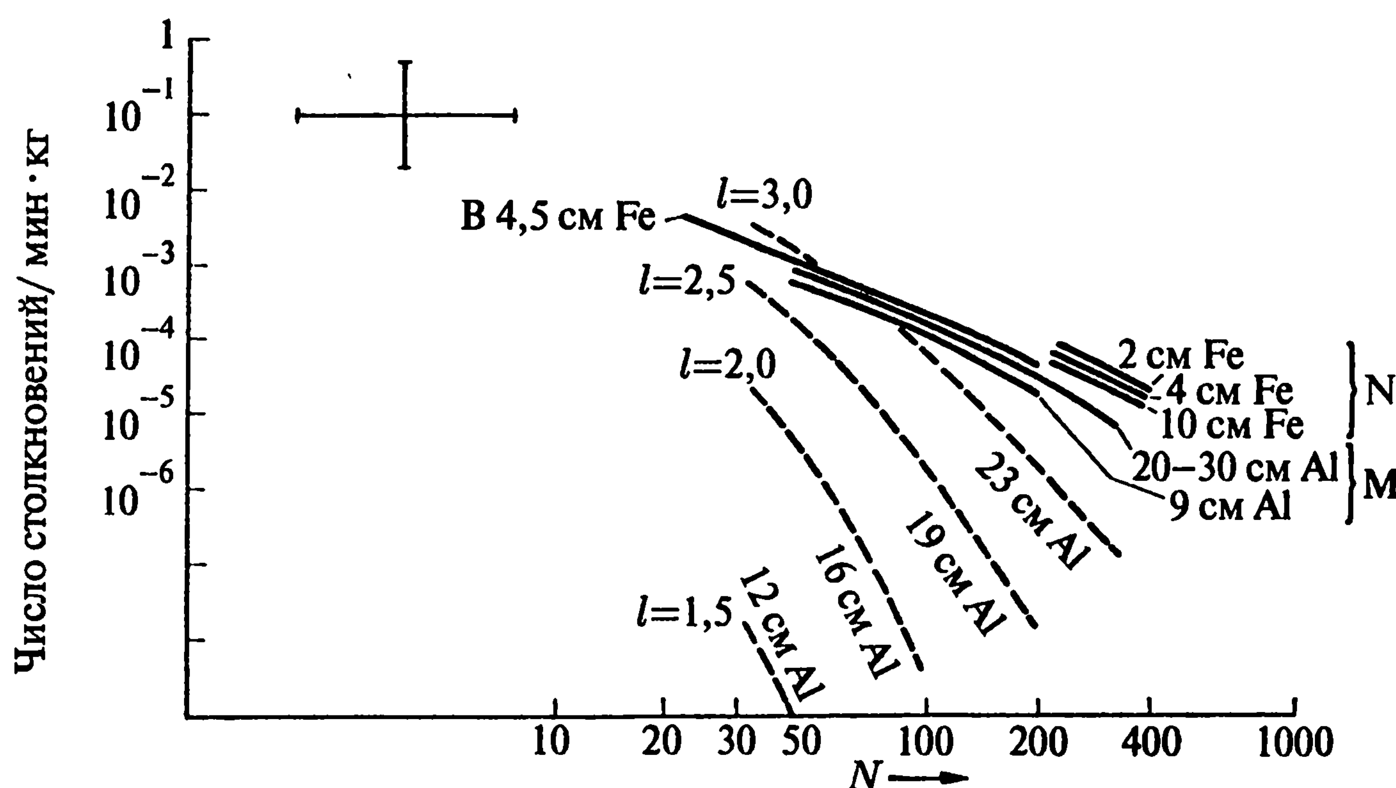


Рис. 25. Распределение толчков в тонких слоях. Абсцисса: величина толчков N (масштаб логарифмический). Ордината: частота толчков более чем из N частиц в мин · кг (масштаб логарифмический). — — — — по каскадной теории (§ 11γ для $\gamma = 1{,}5$, общий множитель произвольный). ——— — измерения: M — Мессершмидт, N — Ни, B — Бёггильд. ┼ — пределы неточности при сравнении измерений M, N, B

кривые почти совпадают, означает, что здесь частота толчков возрастает с толщиной слоя почти линейно; в полную противоположность этому мы должны были бы ожидать, что частота толчков зависит от толщины слоя значительно сильнее, если бы в тонких слоях легких материалов толчки были бы каскадными ливнями, как показано пунктирными линиями на рис. 25; например, число толчков на 1 см^2 в мин в 30 см Al в соответствии с каскадной теорией должно было бы более чем в 10^5 раз превышать их число в 10 см Al. В действительности же число

толчков примерно из 200 частиц в 30 см Al на 1 $см^2$ в мин, согласно Ни[207], больше, чем в 9 см Al, только в 3–4 раза. Если к тому же будут подтверждены измерения частоты толчков в тонких слоях в более чистых условиях, исключающих влияние стен помещения, то мы должны будем сделать вывод, что некаскадные толчки возникают в процессах типа взрыва, так как только при образовании толчков на одном ядре можно объяснить линейный рост частоты их появления при увеличении толщины слоя.

Вопрос о том, будут ли *вторичные частицы*, возникающие при взрывах, легкими или тяжелыми электронами, может быть решен в опытах с толчками. Хотя на этот вопрос сегодня мы не получили еще ясного ответа, проделанные до сих пор опыты указывают, по-видимому, скорее на образование тяжелых электронов, нежели на преимущественное возникновение легких электронов. Решение вопроса может быть получено в опытах с совпадениями толчков. Согласно Ни[208], число толчков более чем из 100 частиц в 10 см Fe, которые проходят сразу через две камеры, убывает на 1/5, если между камерами находится слой свинца толщиной 9 см. Это можно объяснить скорее всего тем, что при взрывах образуются тяжелые электроны, а не легкие электроны, так как для последних мы должны были бы наблюдать более сильный спад, примерно до 1% начальной интенсивности[209]. Однако получить достоверный ответ сегодня еще невозможно. Природа вторичных частиц может быть определена также из «переходных эффектов»: слой из нескольких сантиметров свинца должен умножать толчки из 10–20 см алюминия, если они содержали бы электроны, но число толчков изменится очень слабо, если в них возникают тяжелые электроны. До сих пор такие переходные измерения были проведены Бёггильдом[210] только для тех слоев, в которых толчки бесспорно обусловлены каскадами, а именно для свинца при максимуме частоты толчков. Они подтвердили электронную природу и вместе с этим каскадный характер толчков в максимуме кривой возбуждения для свинца. Соответствующие измерения в слоях такой толщины, при которой происходят взрывы (например, 10–20 см Al), могли бы дать ответ на вопрос о вторичных частицах, возникающих при взрывах. Правда, при этом следует учитывать, что и тогда взрывные толчки в толстых слоях будут сопровождаться значительными количествами электронов (около 20–40%), если вначале в ливне образуются только тяжелые электроны, так как останавливающиеся на последних сантиметрах своего пробега тяжелые электроны прибавляют к ливню продукты своего распада. Такого умножения электронов можно избежать только в том случае, если мы будем наблюдать толчки под тонкими слоями толщиной примерно 10–20 см Al или 2–4 см Fe, так как тогда в материале останавливается очень мало тяжелых электронов, которые могли бы давать дополнительное излучение.

Если мы теперь временно предположим, что при взрывах образуются преимущественно тяжелые электроны, то по участку кривой нарастания взрывных толчков мы можем оценивать длину пробега и с нею энергию тяжелых электронов[211]. Так, по участку нарастания 10 см для Fe (рис. 23) мы получаем (таблица 6) среднюю *энергию* около

$$E_k \simeq 10^8 \text{ эВ} \tag{62}$$

---

207) *Nie H.* Zs. Phys., 1936, **99**, 453.

208) *Nie H.* Zs. Phys., 1936, **79**, 776.

209) *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

210) *Böggild J. K.* Op. cit.

211) *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

для вторичных частиц при взрывах, по порядку величины в согласии с критической энергией, указанной в § 15. Таким образом, для возбуждения взрыва из N частиц требуется в среднем тяжелый электрон с энергией

$$E \simeq N \cdot 10^8 \text{ эВ}. \qquad (63)$$

Следовательно, тяжелый электрон, возбуждающий каскадный ливень той же величины в максимуме кривой возбуждения для свинца:

$$E = 8NE_j = 8 \cdot 10^7 \cdot N \text{ эВ} \simeq 10^8 \cdot N \text{ эВ}.$$

Эффективное сечение возбуждения взрывного ливня электроном теперь можно определить, сравнивая эмпирическую интенсивность взрывов в толстых слоях свинца с эмпирической интенсивностью каскадов в максимуме кривой возбуждения для свинца. В соответствии с рис. 23 интенсивность этих двух процессов относится примерно как 1 : 1, и это отношение 1 : 1, по-видимому, удивительно мало изменяется в диапазоне толчков от малых, насчитывающих около 30 частиц[212], до очень больших, содержащих 1 000 частиц[213]. Поскольку в соответствии с формулами (57), (59) число электронов $F_2(E)$ с энергией выше $E \lesssim 10^{11}$ эВ (рис. 23) относится на уровне моря к числу проникающих частиц $F(2E)$ с энергией выше $2E$, как

$$\frac{F_2(E)}{F_s(2E)} = \frac{10^7 \text{ эВ}}{E},$$

и поскольку каждый электрон возбуждает каскад, то для вероятности того, что один тяжелый электрон с энергией E произведет на участке нарастания 10 см Fe один взрыв, мы получаем приближенно

$$\frac{10^7 \text{ эВ}}{E} \quad \text{на 10 см Fe}.$$

Так как в одном кубическом сантиметре Fe содержится $8{,}5 \cdot 10^{22}$ атомов, то каждый протон и нейтрон ядра при взаимодействии с налетающим электроном с энергией $E > 10^9$ эВ будет иметь эффективное сечение возбуждения взрыва, равное

$$Q \simeq \frac{1}{2} \cdot 10^{-27} \text{ см}^2 \quad \left(\frac{10^9 \text{ эВ}}{E}\right). \qquad (64)$$

По порядку величины это эффективное сечение также отвечает теоретическим предсказаниям § 15. Эмпирический закон, согласно которому эффективное сечение при высоких энергиях убывает, по-видимому, обратно пропорционально энергии, сегодня, разумеется, еще не может быть обоснован теоретически.

Если этот закон (64) правилен, то при очень больших толчках, $N > 1\,000$, мы должны снова наблюдать возрастание отношения интенсивности в максимуме к интенсивности в насыщении (рис. 23), потому что тогда появляется каскадный спектр (рис. 24).

Проведенное до сих пор рассмотрение объясняет толчки Гофмана для толстых слоев в приближении, в котором они предполагаются одинаково частыми во всех материалах, а их насыщение достигается в слоях одинаковой массы (10 см Fe,

---

[212] *Young R. T., Street J. C.* Op. cit.; *Böggild J. K.* Op. cit.

[213] *Carmichael H.* Op. cit.

>30 см Al). Ведь взрывы должны возбуждаться пропорционально массе и поглощаться также примерно пропорционально массе. Однако в действительности ливни в толстых слоях легких материалов оказываются более интенсивными, чем в толстых слоях тяжелых материалов, и соответственно области насыщения начинаются для легких материалов при несколько больших массах, чем для тяжелых (рис. 23 и 19). Путь к пониманию этой еще необъясненной зависимости от материала открывается, возможно, предположением, что еще в ядре в момент своего возникновения при взрыве частицы тормозятся путем ионизации ядра[214)] (§ 16, 24). Это торможение, которому подвергаются прежде всего самые медленные тяжелые электроны в ливне, могло бы иметь большее значение в тяжелом ядре свинца, чем в легком ядре алюминия, т. е. могло бы послужить причиной наблюдаемого более интенсивного образования ливней в легких материалах. Однако теоретическая оценка этого эффекта сегодня еще невозможна.

Рассмотренная здесь, но еще необъясненная зависимость от материала наряду в толчками Гофмана имеет место для особого вида совпадений Росси, исследовавшегося в последнее время Шмайсером и Боте[215)].

Различные авторы[217)], регистрируя совпадения Росси, обнаружили признаки второго максимума при 10–20 см свинца. Шмайсеру и Боте[218)] удалось получить второй максимум особенно сильной интенсивности при наблюдении под острыми углами. Отчетливо выраженный второй максимум (рис. 26) был получен при 17 см Pb, 30 см Fe; напрашивающееся предположение о том, что второй максимум образуется меньшими взрывами, большие боковые части которых мы наблюдаем в толчках Гофмана некаскадного типа, становится вероятным по следующим причинам.

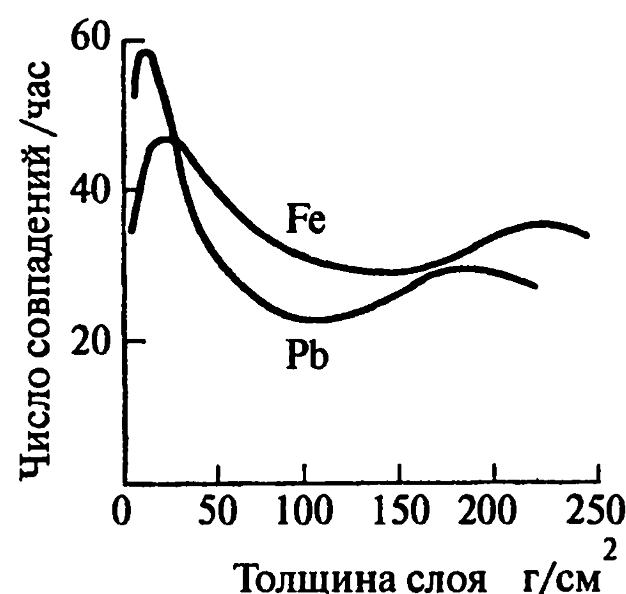


Рис. 26. Второй максимум тройных совпадений Росси под острым углом около 7° по Шмайсеру и Боте[216)] (см. рис. 19). Абсцисса: толщина слоя. Ордината: число совпадений в час

а) Второй максимум вызывается проникающей компонентой, как показали Шмайсер и Боте своими измерениями в подвале, когда первый максимум был уменьшен из-за поглощения мягкого излучения, тогда как второй максимум почти не изменился.

б) Второй максимум наступает в слоях, толщина которых (17 см Pb, 30 см Fe) сравнима с толщиной насыщающих слоев некаскадных толчков (3–8 см Pb, 10 см Fe). Толщина их примерно втрое больше, чем толщина соответствующих слоев для толчков Гофмана, что позволяет оценить вторичную энергию вторичных частиц примерно в $3 \cdot 10^8$ эВ, если эти частицы считать тяжелыми электронами. Вероятно, в ливнях Шмайсера—Боте сначала образуются тяжелые электроны, потому что иначе большие пробеги электронов, достигающие 17 см Pb, были бы трудно объяснимы. Несмотря на это при последующем распаде к наблюдаемым ливням опять добавлялись бы электроны.

в) Угол расхождения взрывного ливня, полная энергия которого велика по сравнению с энергией покоя ядерной частицы 10^9 эВ, по законам сохранения, должен

---

214) *Euler H.* Naturwiss., 1938, **26**, 382; *Euler H.* Zs. Phys. Im Erscheinen 1938.

215) *Schmeisser K., Bothe W.* Op. cit.; *Schmeisser K.* Op. cit.

216) *Schmeisser K., Bothe W.* Op. cit.

217) *Rossi B.* Zs. Phys., 1933, **82**, 151; *Maass H.* Zs. Phys. 1934, **35**, 858; *Drigo A.* Ricerca scient., 1934, **5**, 88; *Hummel J. N.* Naturwiss., 1934, **22**, 170.

218) *Schmeisser K., Bothe W.* Op. cit.; *Schmeisser K.* Op. cit.

быть острым. Затем этот угол должен лишь несколько расшириться вследствие упругого рассеяния ливневых частиц, поскольку они обладают высокими импульсами (в противоположность вторичным частицам каскадного ливня). Это обстоятельство можно было бы связать с обнаруженной Шмайсером и Боте малостью углов расхождения ливней для второго максимума кривой Росси; оно подсказывает нам также, что и среди толчков Гофмана взрывы должны отличаться от каскадов острыми углами расхождения.

г) Для вторых максимумов (рис. 26) существует такая же необъясненная зависимость от материала.

Зависимость от материала для рассматриваемых здесь вторичных эффектов имеет известное сходство с еще необъясненными «переходными эффектами» в толстых слоях. Под «переходным эффектом» мы понимаем быстрое изменение кривой поглощения, при измерении интенсивности в ионизационной камере, происходящее при переходе от одного поглощающего материала к другому[219]. Переходные эффекты в более тонких слоях толщиной меньше примерно 100 г/см^2 обнаруживают возрастание ионизации, когда свинец помещается под алюминием, и убывание ионизации, когда свинец находится над алюминием. Переходные эффекты в более толстых слоях ведут себя точно наоборот. Теория излучения[220] и, в частности, каскадная теория[221] объясняет переходные эффекты в более тонких слоях, так как свинец может еще умножать лучи из алюминия, а алюминий лучи из свинца не умножает. Однако ответственность за переходные эффекты под толстыми слоями должны нести совсем другие вторичные процессы, которые обнаруживают такую же зависимость от материала, как толчки Гофмана в толстых слоях и совпадения Шмайсера—Боте.

§ 25
Ядерные процессы

В высотном излучении часто регистрировались тяжелые частицы, ионизирующие значительно сильнее, чем обычные электроны. Такие частицы регистрировались, с одной стороны, в камере Вильсона, в частности, в уже упоминавшихся работах Андерсона и Неддермейера[222], а также Броде и Старра[223], и, с другой стороны, в следах, оставляемых сильно ионизирующими частицами в чувствительном слое фотопластинок. Различные исследователи (Герцог и Шеррер[224], Рамбаф и Лочер[225], Фюнфер[226], Шоппер[227], Блау и Вамбахер[228], Тейлор[229]) длительное время подвергали воздействию космических лучей фотопластинки частью в лаборатории, частью на большой высоте и после этого обнаруживали в них следы, которые проще всего было истолковать как траектории протонов. Блау и Вамбахер[230], кроме того,

219) *Schindler H.* Zs. Phys., 1931, **72**, 625.
220) *Geiger H.* Erg. exakt. Naturwiss., 1935, **14**, 42.
221) *Carlson J. F., Oppenheimer J. K.* Op. cit.; *Bethe H., Heitler W.* Op. cit.
222) *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Op. cit.
223) *Brode R. B., Starr M. A.* Op. cit.
224) *Herzog G., Scherrer P.* J. Physique et Radium, 1935, **6**, 489.
225) *Rumbough G. H., Locher G. L.* Phys. Rev., 1936, **49**, 855.
226) *Fünfer E.* Naturwiss., 1937, **25**, 235.
227) *Schopper E.* Naturwiss., 1937, **25**, 557.
228) *Blau M., Wambacher H.* Nature (Lond.), 1937, **140**, 585.
229) *Taylor.* Nature (Lond.), 1938.
230) *Blau M., Wambacher H.* Op. cit.

наблюдали «звезды» таких следов, т. е. точки в фотопластинках, из которых очевидным образом исходили несколько протонов одновременно (рис. 27). Наконец, Тейлор[231] в некоторых местах своих пластинок наблюдал «скопления» таких следов.

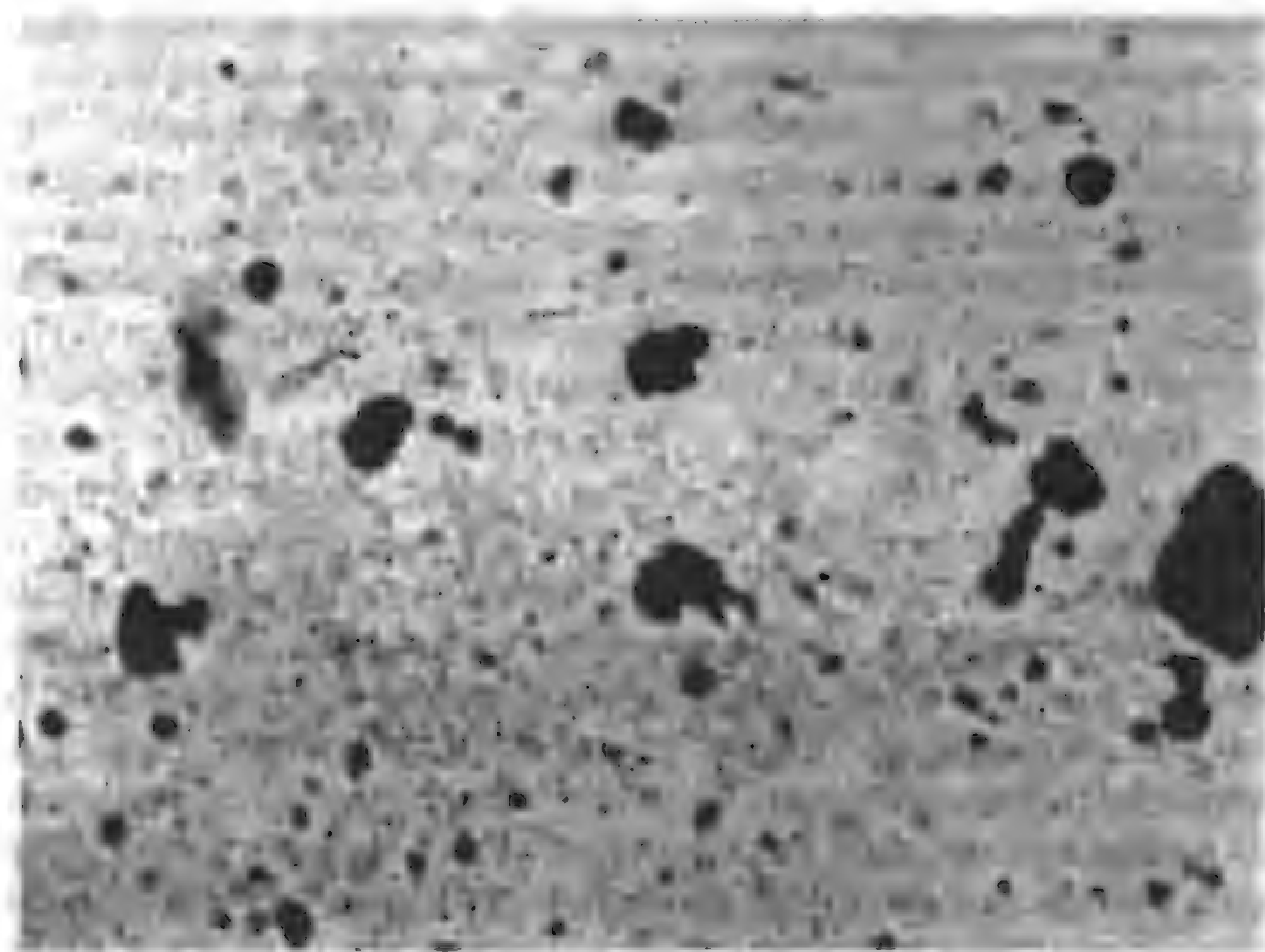


Рис. 27. Испарение ядра по Блау и Вамбахеру[232]

Характерная особенность сравнительно медленных тяжелых частиц заключается прежде всего в сильном возрастании их числа с высотой. Андерсон и Неддермейер нашли на Пайк-Пике примерно в 12 раз больше следов медленных частиц, чем на уровне моря. Аналогичные соотношения имеют место также для следов протонов на фотопластинках, тогда как для звезд на фотопластинках Тейлор наблюдал еще более сильное возрастание с высотой. Отсюда следует, что сильно ионизирующие следы образуются сильно поглощаемыми лучами. Большинство исследователей до сих пор предполагало, что сильно ионизирующие следы должны принадлежать главным образом медленным протонам. Однако нельзя исключать и того, что некоторая часть сильных следов образована медленными тяжелыми электронами. Кроме того, в отдельных случаях здесь может идти речь также об α-частицах. Следы звезд Блау и Вамбахера большей частью, вероятно, вызваны протонами.

Об излучении, косвенно являющемся причиной этих следов, известно только то, что оно очень сильно поглощается в атмосфере. Отсюда следует, что тяжелые электроны и протоны очень высокой энергии могут участвовать в образовании медленных протонов лишь в незначительном количестве. Таким образом, в состав возбуждающего излучения могут входить только электроны и световые кванты, также протоны и нейтроны не слишком высокой энергии. Если тяжелые частицы образуются в ядре электронами или световыми квантами, то с достаточной вероятностью это могло бы происходить, пожалуй, только в процессах, возникающих при взаимодействии электрических сил с ядерными (§ 15); например, можно было бы рассматривать процесс, обратный тому, который обсуждался в § 15, а именно: световой квант достаточно высокой энергии при столкновении с нейтроном рождает

[231] *Taylor.* Op. cit.

[232] *Blau M., Wambacher H.* Nature (Lond.), 1937, **140**, 585.

отрицательно заряженный тяжелый электрон, причем одновременно нейтрон превращается в протон, принимая на себя часть энергии светового кванта. Если энергия светового кванта достаточно велика, то вместо этого процесса будет происходить множественный процесс типа взрыва. Эффективное сечение этого процесса, как и только что упомянутого выше, можно оценить величиной около 10^{-27} см^2 (§ 15). Возбуждение аналогичного процесса электроном будет происходить еще реже, с коэффициентом $\simeq e^2/\hbar c$. Снимки Андерсона и Неддермейера[233] показывают, что медленные протоны часто наблюдаются одновременно с каскадным ливнем. Это обстоятельство указывает на то, что медленные протоны действительно возбуждаются световыми квантами. При высоких энергиях этих световых квантов это, вероятно, может происходить только в указанных выше процессах. При меньших энергиях светового кванта можно также думать о прямом фотоэффекте на ядре, который был зарегистрирован Боте и Гентнером[234]. Однако в результате такого фотоэффекта из ядра могли бы вылетать только очень медленные протоны, которые в большинстве случаев поглощаются в веществе, в котором они образовались, настолько быстро, что не доходят до камеры Вильсона. Вызывает также большие сомнения вопрос о том, может ли этот ядерный фотоэффект играть заметную роль в эмпирически наблюдаемых следах протонов. Но даже в том случае, когда мы возьмем за основу какой-нибудь другой из названных выше процессов, объяснить относительно большое наблюдаемое количество медленных протонов, по-видимому, трудно. Ведь теоретические оценки эффективных сечений пока настолько неопределенны, что выносить по ним суждение о значении этого небольшого несоответствия с теорией еще невозможно. Вероятно, некоторая часть медленных протонов может быть образована также протонами или нейтронами средних энергий. Здесь следует думать о том, что в процессах, ведущих к возникновению проникающей компоненты высотного излучения и тоже принадлежащих к названным выше типам, всегда получаются также протоны и нейтроны средней энергии. В частности, в тех взрывах, которые вызываются световыми квантами или электронами при высоких энергиях, часто упоминают тяжелые частицы в области энергии $10^8 - 10^9$ эВ. Эти частицы, которые быстро поглощаются на пути из стратосферы, где они главным образом и возникают, могут быть ответственными, хотя бы частично, за появление медленных протонов. Действительно, Андерсон и Неддермейер полагали, что им удалось обнаружить на одном из снимков расщепление ядра нейтроном, причем этот нейтрон, разумеется, снова появлялся одновременно с более мощным ливнем. Возможно, что здесь имел место взрывной ливень, однако фотография не позволяет делать однозначное заключение на этот счет. Относительно звезд, наблюдавшихся Блау и Вамбахером, вероятно, наиболее естественно предполагать, что они возникают в процессах вторичных воздействий протонов или нейтронов средних энергий (от 10^8 до $6 \cdot 10^8$ эВ), т. е. при «ядерной ионизации». Здесь мы имеем дело с процессами, в которых тяжелая частица с энергией в указанной области попадает извне в атомное ядро и возбуждает в нем вторичные частицы; или же тяжелая частица возбуждается в атомном ядре пришедшим извне световым квантом и потом, вылетая из атомного ядра, создает в нем вторичные частицы. В последнем случае одновременно с протонами из атомного ядра вылетает также частица Андерсона — одна или несколько, если энергия светового кванта достаточна для этого. Тогда мы снова приходим к процессам взрывного характера, происходящим, естественно, в большинстве случаев с одним ядром и приводящим к испусканию вторичных частиц из этого ядра.

[233] *Anderson C. D., Neddermeyer S. H.* Op. cit.

[234] *Bothe W., Gentner W.* Zs. Phys., 1937, **107**, 236.

Испускание из ядра вторичных частиц во всех названных выше случаях в большинстве случаев будет также сопровождаться еще и таким испарением из ядра, которое исследуется в обычной ядерной физике. Если мы будем предполагать, что взрывы представляют собой более редкие события и что также и в звездах Блау—Вамбахера речь идет в большинстве о вторичных частицах, которые создаются тяжелой частицей средней энергии, то энергетический спектр этих вторичных частиц можно будет сравнивать с теоретическим спектром, определяемым по формуле (38). При таком сравнении оказывается, что существующие на сегодня измерения, по-видимому, хорошо согласуются с теорией. Правда, сколько-нибудь надежное теоретическое истолкование скоплений, наблюдавшихся Тейлором, пока невозможно.

К ТЕОРИИ ЛИВНЕЙ ВЗРЫВНОГО ТИПА В КОСМИЧЕСКИХ ЛУЧАХ. II*

Цель работы — подробно изучить вопрос, возможны ли по теории Юкавы множественные процессы и если да, то при каких условиях.

I. Общие свойства множественных процессов.
   а) Общий обзор.
   б) Вероятность спектра испущенных частиц.
   в) Квантовотеоретические эффективные сечения.
II. Применение к теории Юкавы.
   а) Излучение при столкновении.
   б) Взаимное рассеяние мезонов.
   в) Рассеяние мезона на протоне.
III. Сравнение с экспериментальными результатами.
   а) Эффективные сечения при высоких энергиях.
   б) Множественные процессы.

В предшествующей работе автора[1] было показано, что в соответствии с теорией взрывное возникновение большого числа вторичных частиц может происходить в том случае, если энергия взаимодействия в функции Гамильтона (при соответствующей нормировке) содержит множитель, имеющий размерность длины в некоторой степени. Этот результат был там применен к теории β-распада Ферми, причем было показано, что в теории Ферми существует возможность предсказывать образование взрывных ливней при указанном условии. Последовавшее затем открытие мезона и его радиоактивного распада дает веские доводы в пользу теории Юкавы, так что в общих основах ее можно уже не сомневаться. Поэтому многие авторы уже изучали вопрос о том, допускает ли также и теория Юкавы возможность взрывов[2]. Эти исследования вначале привели к выводу, что в соответствии с теорией Юкавы должны происходить процессы, в которых возникают одновременно несколько мезонов; однако Баба[3] недавно получил несколько иной результат. Первая часть настоящей работы содержит совершенно общее и более точное, чем прежде, рассмотрение следствий из теории того типа, который был указан в работе l. c., и в особенности рассмотрение тех следствий, которые позднее допускают прямое сравнение с опытом. Во второй части рассматривается теория Юкавы с точки зрения полученных следствий. Наконец, в третьей части проводится сравнение с опытом.

---

* Zur Theorie explosionsartigen Schauer in kosmischen Strahlung. II. — Zs. Phys., 1939, **113**, 61–86. *Перевод А. А. Сазыкина.*

[1] *Heisenberg W.* Zs. Phys., 1936, **101**, 533. — Русский перевод: с. 522–527; в дальнейшем цитируется как l. c.

[2] *Bhabha H. J.* Proc. Roy. Soc., 1938, **A 166**, 501; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc., 1938, **A 166**, 529; *Yukawa H., Sakata S., Kobayasi M., Taketani M.* Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1938, **20**, 720.

[3] *Bhabha H. J.* Nature, 1939, **143**, 276.

I

ОБЩИЕ СВОЙСТВА МНОЖЕСТВЕННЫХ ПРОЦЕССОВ

а) Общий обзор

Для последующего рассмотрения целесообразно, как и в работе l. с., измерять энергию E в единицах $\hbar c$, а напряженности поля, например $\mathfrak{E}$ и $\mathfrak{B}$, в единицах $\sqrt{\hbar c}$. Таким образом, мы положим $\varepsilon = E/(\hbar c)$; $\mathfrak{e} = (1/\sqrt{\hbar c})\mathfrak{E}$ и т. д. Кроме того, вместо времени t мы введем новую переменную $\tau = tc$. Тогда все физические величины будут иметь размерность длины в некоторой степени. Например, величины ε и $\mathfrak{e}$ будут иметь размерности: см$^{-1}$, см$^{-2}$. В соответствии с работой l. с. множественные процессы при столкновении элементарных частиц могут происходить в том случае, если функция Гамильтона или Лагранжа содержит функцию взаимодействия, умноженную на универсальную длину в некоторой степени. Простой пример такой теории дает функция Лагранжа[4]

$$L = \frac{1}{l^4}\sqrt{1 + l^4\left[\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\tau}\right)^2 - (\nabla\varphi)^2\right]}, \tag{1}$$

где φ — скаляр размерности, см$^{-1}$, l — постоянная размерности, см. Волновая функция, канонически сопряженная φ, здесь будет иметь вид

$$\pi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}} = \frac{\partial\varphi}{\partial\tau}\left\{1 + l^4\left[\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\tau}\right)^2 - (\nabla\varphi)^2\right]\right\}^{-1/2}.$$

Известным способом получится также перестановочное соотношение

$$\pi(\mathfrak{r})\varphi(\mathfrak{r}') - \varphi(\mathfrak{r}')\pi(\mathfrak{r}) = -i\delta(\mathfrak{r}\,\mathfrak{r}'). \tag{2}$$

Но, как известно, последовательное построение теории, основанной на уравнениях (1) и (2), невозможно вследствие того, что значения собственной энергии расходятся. Поэтому уравнения (1) и (2) могут служить только, в духе принципа соответствия, в качестве неких вех для будущей теории. Если, например, необходимо изучать столкновение элементарных частиц низкой энергии ($\varepsilon \ll 1/l$), то функцию Лагранжа можно разложить в ряд по степеням волновой функции φ, после чего в теории возмущений следует учитывать только те члены высших порядков, которые не приводят к бесконечной величине собственной энергии. Затем с помощью этого приближения можно определить, например, эффективное сечение взаимного рассеяния частиц или сечение возникновения новых частиц малой энергии[5]. Однако при рассмотрении столкновения между частицами очень высоких энергий ($\varepsilon \gg 1/l$) такой метод становится бессмысленным. Поэтому для такого случая в работе l. с. было предложено искать решения уравнения (1) без учета соотношений (2), т. е. в соответствии с классической теорией. Обе элементарные частицы следует тогда заменить волновыми пакетами с соответствующими длинами волн и величинами энергии, после чего остается только посмотреть, что происходит при столкновении двух волновых пакетов. Именно в том случае, если при столкновении рождаются вторичные частицы, можно ожидать, что подобное рассмотрение столкновения по классической теории послужит хорошим приближением к будущей

[4] См. по этому поводу *Born M.* Proc. Roy. Soc. London, 1933, A **143**, 410.

[5] См., например, рассеяние света на свете: *Euler H., Kockel B.* Naturwiss, 1935, **23**, 246.

теории. Ведь предельный случай очень большого числа частиц часто соответствует предельному случаю очень высоких квантовых чисел.

Целесообразность и действенность такого «полуклассического» метода недавно была доказана в двух важных работах Блоха и Нордсика[6], касающихся испускания излучения электроном при столкновении. Блох и Нордсик показали прежде всего, что в классической теории испускание излучения при столкновении выглядит примерно следующим образом: разность между собственными полями электрона до и после столкновения переходит в момент удара в самостоятельный волновой пакет, который затем перемещается в пространстве в виде излучения. Они показали далее, что средний спектр излучения, испускаемого при столкновении, согласно квантовой теории, совпадает со средним спектром, испускаемым по классической теории, и что флюктуации около этого среднего значения подчиняются флюктуационной формуле Пуассона. Это верно, конечно, лишь с точностью до ограничений, наложенных на процесс столкновения в целом законами сохранения энергии и импульса; однако эти ограничения не играют никакой роли, если обратное влияние излучения на движущийся электрон достаточно мало. Основываясь на результатах Блоха и Нордсика, естественно предположить, что и в будущей теории такие процессы излучения можно будет рассматривать таким образом, что сначала вычисляется «классический» спектр, совпадающий со средним квантовотеоретическим спектром, причем около этого среднего значения происходят флюктуации по формуле Пуассона. Во всяком случае, можно было бы ожидать, что, действуя таким способом, мы подойдем к будущей теории довольно близко; лишь при вычислении «среднего значения» излучения будущая теория, возможно, будет заметно отличаться от полуклассической. Исходя из этой точки зрения, мы можем выделить при рассмотрении множественных процессов две последовательные задачи. Во-первых, для рассматриваемого процесса столкновения следует найти решение волнового уравнения в рамках классической теории и рассчитать спектр цуга волн, распространяющегося от места столкновения. Во-вторых, рассчитанный спектр следует использовать в рамках квантовой теории для определения эффективных сечений искомых единичных процессов. Таким образом, для решения первой задачи, касающейся вычисления среднего спектра, можно использовать аналогии, применяя принцип соответствия. Только во второй задаче квантовая теория вступает в свою роль.

б) Средний спектр испускания

Если имеется некоторая функция Лагранжа типа (1), в которой содержится только одна разновидность частиц, т. е. только одна волновая функция, то процессы столкновения при высоких энергиях всегда можно рассматривать, заменяя, как в работе l. c., испытывающие соударение частицы нормированными волновыми пакетами, отталкивающимися друг с другом. Энергия этих волновых пакетов может быть большой по сравнению с $1/l$, а их протяженность в направлении движения — малой по сравнению с l, причем выражение $l^4[(\partial\varphi/\partial\tau)^2 - (\nabla\varphi)^2]$ вовсе не обязано иметь из-за этого порядок величины 1 или больше. Дело в том, что такой высокоэнергичный волновой пакет можно получить из волнового пакета меньшей энергии путем простого преобразования Лоренца, которое оставляет инвариантным выражение $(\partial\varphi/\partial\tau)^2 - (\nabla\varphi)^2$. Напротив, диаметр пакета, перпендикулярный направлению движения, не может быть сделан меньше l, если при этом выражение $l^4\left[(\partial\varphi/\partial\tau)^2 - (\nabla\varphi)^2\right]$ одновременно не возрастает по порядку величины

[6] *Bloch F., Nordsieck A.* Phys. Rev., 1937, **52**, 54; *Nordsieck A.* Phys. Rev., 1937, **52**, 59. Пределы применимости этого метода были рассмотрены В. Паули и М. Фирцем (*Pauli W., Fierz M.* Nuovo Cim., 1938, **15**. — Русский перевод: *Паули В.* Труды по квантовой теории. Статьи 1928–1958. М.: Наука, 1977. С. 274).

до 1, т. е. если нелинейные поправки к обычному волновому уравнению не станут существенными. Таким образом, волновой пакет, поперечные размеры которого меньше l, вообще уже нельзя рассматривать как изображение одной единственной частицы. Из сказанного можно было бы, пожалуй, прийти к выводу, что правило волновой механики, согласно которому эффективные сечения не могут стать больше, чем квадрат длины волн участвующих в переносе частиц, здесь уже может быть недействительным. В теории, основанной на формулах типа (1) и (2), существует возможность того, что полные эффективные сечения столкновения в предельном случае весьма высоких энергий сталкивающихся частиц будут стремиться к некоторому предельному значению порядка l^2, не зависящему от энергии. Разумеется, это предельное значение не может быть существенно больше l^2 — естественно, за исключением того случая, когда между сталкивающимися частицами имеются дальнодействующие силы (например, аналогичные кулоновским), для которых указанное выше правило волновой механики не выполняется. С этим предельным значением полного эффективного сечения можно было бы связать наглядный образ: «размер рассматриваемой элементарной частицы», но при этом надо помнить, что эффективное сечение относится всегда к *двум* частицам, а не к одной отдельной частице.

Если мы обратимся теперь к рассмотрению столкновения двух волновых пакетов очень высокой энергии, основываясь на волновом уравнении с функцией Лагранжа (1), то, как было сказано в работе l. c., в той области, где сталкиваются волновые пакеты, значительно возрастает роль нелинейных членов уравнения, вследствие чего начинается турбулентное движение, изменяющее спектр волнового пакета. Такое турбулентное движение снова перейдет в собственно волновое движение только в том случае, если величина $l^4[(\partial\varphi/\partial\tau)^2 - (\nabla\varphi)^2]$ останется малой по сравнению с единицей во всей области — что вообще произойдет только тогда, когда волновой процесс распространится на некоторую большую сферу. Диаметр этой сферы, по оценкам на основании функции (1) и уравнений (8)–(11) работы l. c., составляет примерно $l(l/\lambda)^{1/3}$, где λ — длина волны частиц до столкновения. Следовательно, в сферической области такого размера должно происходить нерегулярное движение, и теперь остается посмотреть, какой вид имеет спектр этого движения.

Если бы было возможно на миг насильственно удержать волновой пакет внутри полости размера l^4/λ, то уже по истечении времени порядка l там установилось бы тепловое равновесие, которому соответствует распределение Планка[7]. Температуру этого распределения можно определить по плотности энергии. Плотность энергии имеет порядок величины $\lambda^{-1}/l^4\lambda^{-1} = l^{-4}$, так что для соответствующей температуры (в энергетической шкале) по закону Стефана—Больцмана получается порядок величины l^{-1}. Следовательно, спектр испускания при больших частотах ν должен достичь максимума при $\nu \sim 1/l$ и далее затухать по закону $\exp(-\nu l)$. Однако в действительности взрыв происходит слишком быстро и тепловое равновесие не успевает установиться. Поэтому, вероятно, хотя большая часть энергии в спектре и будет расположена вблизи $1/l$, но при больших частотах спектр будет спадать медленнее, чем в распределении Планка. Мне не удалось даже в простейших случаях найти для нелинейного волнового уравнения удовлетворительное решение, которое могло бы дать ответ на вопрос о спектральном распределении. Численные расчеты, по-видимому, показывают, что, хотя значение $\nabla\varphi$ в волновой области уменьшается до величины порядка $1/l^2$, вторые производные, например, $\Delta\varphi$, в некоторых местах все-таки остаются большими (порядка $1/l^2\lambda$). В таком случае спектр при высоких частотах должен спадать по степенному закону. Таким образом, вопрос о точной

[7] Разумеется, распределение Планка получается при расчетах только при правильном применении квантовой теории.

теоретической форме спектра остается пока открытым, и выводы об общих свойствах спектра придется, быть может, извлекать в каждом отдельном случае из опыта.

Под словом «спектр» здесь понимается преобразование Фурье волнового пакета, который распространяется после столкновения, не изменяя своего спектрального распределения после того, как цуг волны переместится на достаточно большое расстояние. Спектральное распределение может быть получено непосредственно при возведении абсолютной величины коэффициентов Фурье в квадрат. Для энергии, излучаемой в интервале волновых чисел dk ($k = 2\pi/\lambda$ — «волновое число») в элемент телесного угла $d\Omega$, мы введем для последующих расчетов следующее обозначение

$$f(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k} = f(\mathfrak{k})k^2\,dk\,d\Omega. \tag{3}$$

Тогда для полной энергии волнового пакета имеем

$$\varepsilon = \int f(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}. \tag{4}$$

в) Квантовотеоретические эффективные сечения

В работе Блоха и Нордсика показано, что при испускании излучения электроном, мало отклонившимся при соударении, среднее значение квантовотеоретического спектра совпадает с «классическим» спектром, причем флюктуации около этого среднего значения подчиняются формуле Пуассона[8]. Представляется естественным предположить нечто подобное и для рассматриваемой здесь проблемы излучения. Если мы возьмем за основу спектры (3) и (4), то это будет означать, что вероятность $\alpha(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}$ найти элементарную частицу в интервале импульсов $d\mathfrak{k}$ должна быть равна $\alpha(\mathfrak{k}) = f(\mathfrak{k})/k$. Тогда вероятность того, что испускается *только* эта одна частица, будет равна $N\alpha(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}$.

Нормировочный множитель N, наглядно означающий вероятность того, что во всей остальной части пространства импульсов частица не излучается, имеет следующее значение

$$N = \exp\left\{-\int \alpha(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}\right\}. \tag{5}$$

В более общем случае вероятность того, что одна частица испускается в интервале импульсов $d\mathfrak{k}_1$, вторая — в интервале $d\mathfrak{k}_2$ и т. д., дается формулой:

$$dw_n = N\alpha(\mathfrak{k}_1)\,d\mathfrak{k}_1\alpha(\mathfrak{k}_2)\,d\mathfrak{k}_2\ldots\alpha(\mathfrak{k}_n)\,d\mathfrak{k}_n. \tag{6}$$

Поэтому полная вероятность того, что испускается в точности n частиц, будет иметь вид

$$w_n = \frac{N}{n!}\left(\int \alpha(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}\right)^n, \tag{7}$$

причем знаменатель $n!$ получается потому, что при независимом интегрировании по всем $\mathfrak{k}$ в формуле (6) каждый процесс, в котором испускается n частиц, считается $n!$ раз.

Из формул (5) и (7) следует

$$\sum_0^\infty w_n = 1.$$

[8] *Bloch F., Nordsieck A.* Phys. Rev., 1937, **52**, 54 (уравнение (26)).

Величина

$$\int \alpha(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k} = \int \frac{f(\mathfrak{k})}{k}\, d\mathfrak{k} = \overline{n} \tag{8}$$

означает среднее число испущенных частиц. В случае, рассмотренном Блохом и Нордсиком, среднее число частиц $\overline{n}$ из-за расходимости интеграла (8) становится бесконечным. Однако это обстоятельство не приводит к каким-либо трудностям, поскольку область малых частиц можно рассматривать так, как указано Блохом и Нордсиком, и поскольку в силу независимости флюктуации в различных областях спектра интегрирование в формулах (5)–(8) можно ограничить областью спектра, лежащей выше некоторого конечного значения k. Кроме того, в дальнейшем формулы (5)–(8) мы будем применять в первую очередь к испусканию мезонов, обладающих конечной массой покоя $M_{\text{мез}} = \varkappa\hbar/c$, вследствие чего их энергия удовлетворяет уравнению

$$k_0^2 = \varkappa^2 + \mathfrak{k}^2.$$

Тогда для среднего числа $\overline{n}$ будут справедливы формулы

$$\overline{n} = \int \frac{f(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k}}{k_0}, \quad \alpha(\mathfrak{k}) = \frac{f(\mathfrak{k})}{k_0}. \tag{9}$$

Естественно, $\overline{n}$ остается здесь всегда конечным.

Применимость формул (5)–(9) ограничивается тем, что значения полной энергии и полного импульса испущенных частиц заданы начальным состоянием. Это обстоятельство приводит к тому, что из распределения (6) в известной степени выделяется макроканоническое распределение, в котором полная энергия и полный импульс имеют наперед заданные значения. Обусловленное этим отклонение от распределения (6) математически определить совсем нелегко. Однако во многих случаях это отклонение незначительно. Во всех случаях, когда вычисленное с помощью распределения (6) среднее значение флюктуаций полной энергии и импульса остается малым по сравнению с самой энергией, распределение с заданной энергией также будет отклоняться от распределения (6) не слишком сильно.

Для средней энергии справедлива формула

$$\varepsilon = \int k_0 \alpha(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k} = \int f(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k};$$

далее, из распределения (6) простые вычисления дают:

$$\bar{\varepsilon}^2 = \int k_0^2 \alpha(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k} + \varepsilon^2,$$

так что для среднего квадрата флюктуаций получается

$$\overline{\Delta\varepsilon^2} = \int k_0^2 \alpha(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k} = \int k_0 f(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k}. \tag{10}$$

Аналогично определяется средний квадрат флюктуаций полного импульса:

$$\overline{\Delta\mathfrak{K}^2} = \int \mathfrak{k}^2 \alpha(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k} = \int \frac{\mathfrak{k}^2}{k_0} f(\mathfrak{k})\, d\mathfrak{k}. \tag{11}$$

Уравнение (10) показывает, что для выполнения условия $\Delta\varepsilon \ll \varepsilon$ еще недостаточно, чтобы число частиц $\overline{n}$ было очень большим. Даже при бесконечно большом

числе частиц, как в случае, рассмотренном Блохом и Нордсиком, возможны большие флюктуации энергии, потому что отдельные испущенные частицы могут обладать сравнительно высокой энергией. В соответствии с уравнением (10) для выполнения условия $\Delta\varepsilon \ll \varepsilon$, напротив, необходимо, чтобы энергия распределялась по частицам относительно низкой энергии, как это ясно из наглядных соображений.

Во многих случаях совсем не требуется обращаться к распределению с некоторой известной наперед заданной энергией, и уже в самой постановке задачи предусматривается усреднение по определенным интервалам энергии. В таких случаях можно проводить вычисления, большей частью применяя непосредственно распределение (6). Например, рассматривая излучение электрона при соударении, можно поставить вопрос об эффективном сечении того, что сталкивающаяся частица будет отклонена в некотором определенном направлении независимо от того, с какой энергией она удаляется. При такой постановке задачи с самого начала производится усреднение по некоторым определенным интервалам энергии.

Из приведенных выше соображений ясно, что в совершенно общем случае, как и в работе Блоха и Нордсика, вопрос об эффективных сечениях определенных отдельных процессов не может быть решен просто с помощью сравнений по принципу соответствия. Напротив, простые вопросы всегда имеют следующую форму: каково эффективное сечение некоторого определенного процесса, *независимо от того, что еще происходит при этом процессе*? На такие вопросы можно отвечать на основе принципа соответствия и наглядных соображений. Так, например, в приведенных выше рассуждениях вероятность того, что некоторая частица испускается с импульсом в интервале $d\mathfrak{k}$, равна $f(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}/k_0$, как это очевидно из наглядных соображений. Вероятность того, что испускается только одна частица, равна, напротив, $[f(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}/k_0]\exp\{-\int\alpha(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}\}$; эта формула, очевидно, не имеет аналога в классической теории. Поэтому следует ожидать, что и в окончательной теории полные эффективные сечения процессов первого из названных выше типов будут играть более важную роль, а вычислять их будет проще, чем эффективные сечения каких-нибудь определенных отдельных процессов — в противоположность теперешней теории, в которой эффективные сечения отдельных процессов вычисляются из матричных элементов энергии возмущения, тогда как полные эффективные сечения получаются из них только с помощью довольно сложного суммирования. Итак, в будущей теории особенно простым было бы, например, эффективное сечение того, что вообще происходит столкновение двух элементарных частиц. Однако в некоторых случаях это эффективное сечение становится бесконечно большим; это возможно тогда, когда испускаются частицы без массы покоя, как в процессе, рассмотренном Блохом и Нордсиком. Таким же простым было бы, например, эффективное сечение того, что при столкновении рождается новое вещество (т. е. частицы с конечной массой покоя). Это эффективное сечение всегда конечно, а при возрастающей энергии сталкивающихся частиц оно могло бы во многих случаях приближаться к не зависящему от энергии предельному значению порядка l^2.

II

ПРИМЕНЕНИЕ К ТЕОРИИ ЮКАВЫ

а) Излучение при соударении

Такая форма взаимодействия частиц Юкавы с прочим веществом пока еще неизвестна. Однако для дальнейшего рассмотрения достаточно будет взять упрощенную модель Юкавы[9]. В этой упрощенной теории имеются только нейтральные

[9] См. *Bhabha H. J.* Nature, 1939, **143**, 276.

частицы Юкавы, взаимодействующие с протонами. Для потенциалов поля Юкавы, образующих четырехмерный вектор, будут применяться обозначения $\mathfrak{u}$ и u_0 (в единицах, указанных в разделе Ia, а для напряженностей поля — $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$. Волновая функция протонов пусть будет ψ. Функция Лагранжа всего поля, из которой следуют волновые уравнения, тогда будет иметь вид

$$L = \frac{1}{2}(\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2) + \frac{\varkappa^2}{2}(u_0^2 - \mathfrak{u}^2) + i\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial \tau} - i\psi^* \alpha_k \frac{\partial}{\partial x_k}\psi + \psi^* \beta \psi K. \qquad (12)$$

К этому добавляются соотношения

$$\mathfrak{g}_k = [\nabla \mathfrak{u}]_k - l\psi^* \beta \sigma_k \psi, \quad \mathfrak{f}_k = \dot{\mathfrak{u}}_k - \nabla_k u_0 - il\psi^* \beta \alpha_k \psi.$$

В этих формулах $\varkappa$ и K означают массы покоя мезона и протона, измеренные в см$^{-1}$; следовательно, имеют место соотношения $\varkappa = M_{\text{мез}}c/\hbar$, $K = M_{\text{прот}}c/\hbar$. По одинаковым индексам производится суммирование от 1 до 3. Постоянная l, имеющая размерность длины, связана с обычно применяемой константой взаимодействия g_2 соотношением

$$l = \frac{g_2\sqrt{4\pi}}{\sqrt{\hbar c}} \cdot \frac{\hbar}{M_{\text{мез}}c}.$$

Для l получается из опыта следующая оценка по порядку величины: $l \sim 1/\varkappa$, если формулы теории Юкавы можно применять и в упрощенной ее модели. Взаимодействие, соответствующее константе g_1, ради простоты здесь не учитывается.

Сравнивая поле Юкавы с электромагнитным, мы видим из уравнения (12), что протоны обладают неким «магнитным моментом» величиной $l\sqrt{(\hbar c)/(4\pi)}$. Этот момент имеет следствием то обстоятельство, что вокруг покоящегося протона существует дипольное поле Юкавы.

Рассмотрим теперь столкновение протона с какой-нибудь другой элементарной частицей. В момент столкновения, как и в процессах столкновения, рассмотренных Блохом и Нордсиком, разность собственных полей Юкавы до и после соударения излучается в виде волнового пакета. Этому волновому пакету по спектральному распределению соответствует сначала только небольшое число мезонов.

В частности, если бы мы опустили соответствующее обычной электродинамике взаимодействие с константой связи g_1, то результаты работы Блоха и Нордсика можно было бы применять почти без изменений. При интегрировании энергии по всем направлениям в этой работе получается $\int f(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k} \sim \text{const}/k^2$ для всех частот, малых по сравнению с частотой $k_{\max}$, определяемой временем столкновения. Для более высоких частот интенсивность очень быстро спадает до нуля. Поэтому энергия в интервале от k до $k + dk$ при меньших частотах становится почти независимой от k. Перенося эти результаты в теорию Юкавы, мы можем ожидать, что отклонения от них вследствие конечной массы покоя мезонов будут иметь место только в области очень малых частот порядка $\varkappa$. Эти отклонения очень грубо можно учесть, предположив, что спектр начинается только при частоте $k_0 = \varkappa$, а ниже он имеет такую же форму, как у световых квантов. Тогда среднее число испущенных мезонов приближенно будет определяться формулой

$$\bar{n} \approx \int_{\varkappa}^{k_{\max}} \frac{f(\mathfrak{k})\,d\mathfrak{k}}{k} \approx \text{const} \int_{\varkappa}^{k_{\max}} \frac{dk}{k} = \text{const} \ln \frac{k_{\max}}{\varkappa}. \qquad (13)$$

Таким образом, среднее число мезонов растет лишь логарифмически в зависимости от $k_{\max}$ и полной энергии излучения. Постоянная перед логарифмом с точностью

до множителя порядка 1 равна $g_1^2/\hbar c$. Итак, если освобождающийся при столкновении волновой пакет уходит в пространство, распадаясь на мезоны, то, хотя по формуле (13) и следует ожидать множественных процессов при очень высоких начальных энергиях [10], однако среднее число частиц при этом всегда должно быть малым.

Но согласно теории Юкавы волновой пакет не может распространяться так просто, потому что отдельные части пакета мешают друг другу вследствие взаимодействия, аналогичного «рассеянию света на свете» в электронной теории; в теории Юкавы это взаимодействие играет куда более важную роль, чем в электродинамике.

Мезоны в волновом пакете, сжатые в очень малом объеме, испытывают — в противоположность соответствующим электродинамическим процессам — взаимное рассеяние и при этом рождают новые мезоны, так что происходят как раз такие процессы, какие были рассмотрены в разделе Iб. Для более подробного обоснования сказанного мы рассмотрим с помощью обычного для электродинамики метода взаимное рассеяние мезонов, энергия которых меньше энергии покоя протонов [11].

б) Взаимное рассеяние мезонов

Рассеяние мезонов рассматривается в теории таким образом, что, например, мезон виртуально рождает отрицательный протон и нейтрон, затем мезон рассеивается на одной из этих частиц, после чего обе частицы снова соединяются и образуют новый мезон. В нашей упрощенной теории с нейтральными частицами Юкавы в этой цепочке следует рассматривать виртуальное рождение обычного и отрицательного протонов.

Рассматривая только мезоны малой энергии ($k_0 \ll K$), мы можем считать, что поле Юкавы, выраженное в единицах частоты порядка K, будет изменяться в пространстве и времени медленно [12].

В этом случае занятые состояния отрицательной энергии должны следовать за внешним полем адиабатически, если протоны отсутствуют. Тогда в волновых уравнениях, соответствующих функции Лагранжа (12), мы можем просто выполнить суммирование по всем состояниям отрицательной энергии, и тем самым получить волновые уравнения для одного только поля Юкавы. Правда, это суммирование по состояниям с отрицательной энергией дает расходящийся результат. Поэтому, как и в теории позитронов Дирака, мы должны вычесть из функций Лагранжа и Гамильтона некоторые бесконечные члены. При разложении энергии занятых состояний в ряд по степеням напряженностей поля такие бесконечные суммы встречаются только при низких степенях напряженностей поля, а именно: в теории Дирака — только в квадратичных относительно напряженности поля членах, а в теории Юкавы, как показывают следующие далее расчеты, — также и в членах четвертого порядка. Следовательно, в этих членах низкого порядка мы должны определять вычитаемые бесконечные члены с помощью законов сохранения. Напротив, в членах высшего порядка конечные результаты, полученные при суммировании, можно применять непосредственно без вычитаемых членов. Теперь мы переходим к определению этих членов.

В волновом уравнении для частиц Юкавы имеются произведения $\psi^*\beta\alpha_k\psi$ и $\psi^*\beta\sigma_k\psi$. Поэтому в соответствии с уравнением (12) необходимо определить

---

[10] См. *Bhabha H.J.* Nature, 1939, **143**, 276.

[11] Относительно следующего см. *Heisenberg W., Euler H.* Zs. Phys., 1936, **98**, 714; *Weisskopf V.* Kgl. Dansk. Vid. Selsk., 1936, **14**, 6.

[12] Поскольку постоянное во времени поле Юкавы всегда экспоненциально спадает в пространстве, введенная выше идеализация основывается на неравенстве $\varkappa \ll K$, которое выполняется на опыте не особенно хорошо ($\varkappa \approx 0{,}1K$).

средние значения произведений $\psi^*\beta\alpha_k\psi$ и $\psi^*\beta\sigma_k\psi$ при заданных полях $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$ для случая, когда протоны отсутствуют. Вводя обозначение v_n для собственных функций состояний протона во внешнем поле $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$, мы должны, таким образом, вычислить $\sum v_n^*\beta\alpha_n v_n$ и $\sum v_n^*\beta\sigma_k v_n$, причем суммирование следует производить по всем состояниям отрицательной энергии. Эти суммы равны, очевидно, частным производным выражения для плотности энергии

$$S = \sum_{\text{отр.эн.}} \left\{ iv_n^*\alpha_k \frac{\partial}{\partial x_k} v_n - v_n^*\beta v_n K + l\left[i\mathfrak{f}_k v_n^*\beta\alpha_k v_n - \mathfrak{g}_k v_n^*\beta\sigma_k v_n\right] \right\}, \tag{14}$$

взятым по напряженностям поля. Вследствие того, что напряженности поля изменяются медленно, вместо плотности энергии S можно взять в первом приближении ее значение, усредненное в пространстве по нормировочному объему V, причем объем V должен быть мал по сравнению с областями, в которых напряженности $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$ изменяются существенно, но велик по сравнению с областями размера K^{-3}. Тогда при вычислении частных производных величины $(1/V)\int S\,dV$ по напряженностям поля можно дифференцировать и собственные функции v_n, ибо плотность энергии обладает экстремальным свойством — она не изменяется при малых изменениях собственной функции, если только сохраняется нормировка. Отсюда следует, что величину $(1/V)\int S\,dV$ можно заменить здесь просто суммой отрицательных собственных значений протона в полях $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$. Если мы добавим к уравнениям, получаемым из функции Лагранжа (12):

$$(\nabla\mathfrak{f}) + \varkappa^2 u_0 = 0, \quad [\nabla\mathfrak{g}] - \varkappa^2\mathfrak{u} = 0,$$

еще следующие соотношения

$$\dot{\mathfrak{u}}_k + \nabla_k u_0 = -\frac{\partial\bar{L}}{\partial\mathfrak{f}_k}, \quad [\nabla\mathfrak{u}]_k = -\frac{\partial\bar{L}}{\partial\mathfrak{g}_k};$$

то эта новая функция Лагранжа $\bar{L}$ поля Юкавы будет отличаться в отсутствие протонов от величины $1/2\left(\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2\right)$ на *плотность энергии* занятых состояний и на некоторые расходящиеся величины, которые подлежат более подробному рассмотрению.

Итак, теперь мы должны вычислить собственные значения энергии протона в полях $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$. Для этого мы сделаем специальное предположение, что обе напряженности $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$ постоянны во всем пространстве и каждая из них имеет только одну составляющую по оси z, $\mathfrak{f}_3 = f$, $\mathfrak{g}_3 = g$. Тогда импульсу протона $\mathfrak{p}$ с компонентами p_1, p_2, p_3 (в см$^{-1}$) принадлежит значение энергии ε, которое в соответствии с функцией (12) определяется формулой

$$\varepsilon_{1,2}^2 = K^2 + \mathfrak{p}^2 + l^2\left(g^2 + f^2\right) \pm 2l\sqrt{K^2 g^2 + \left(f^2 + g^2\right)\left(p_1^2 + p_2^2\right)}. \tag{15}$$

Два знака перед квадратным корнем относятся к двум возможным направлениям спина. Бесконечная плотность энергии, созданная занятыми состояниями отрицательной энергии, принимает вид

$$-\frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathfrak{p}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2),$$

и тем самым для функции Лагранжа поля Юкавы получается

$$\bar{L} = \frac{1}{2}\left(\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2\right) - \frac{1}{(2\pi)^3}\int d\mathfrak{p}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) - \text{вычитаемые члены}. \tag{16}$$

Для того чтобы вычислить это выражение, мы разложим ε в ряд по степеням напряженностей поля $\mathfrak{f}$ и $\mathfrak{g}$. Полагая $K^2 + \mathfrak{p}^2 = p_0^2$, мы имеем

$$\varepsilon_{1,2} = p_0 \left[1 + \frac{l^2 (f^2 + g^2)}{p_0^2} \pm \frac{2l}{p_0^2} \sqrt{K^2 g^2 + (f^2 + g^2)(p_1^2 + p_2^2)} \right]^{1/2}. \tag{17}$$

Таким образом, получаем формулу

$$\varepsilon_1 + \varepsilon_2 = 2p_0 \sum_{n,m} \left[\frac{l^2 (f^2 + g^2)}{p_0^2} \right]^2 \left\{ \frac{4l^2}{p_0^4} \left[K^2 g^2 + (f^2 + g^2)(p_1^2 + p_2^2) \right] \right\}^m \times \\ \times \frac{(1/2)!}{(1/2 - n - 2m)!\, n!(2m)!}. \tag{18}$$

Из формулы (18) видно, что члены высших порядков по f и g, начиная с шестого, вносят конечный вклад в функцию Лагранжа, тогда как члены низших порядков расходятся. Поэтому мы можем предположить, что члены низшего порядка станут конечными после вычитания из них соответствующих величин, тогда как члены высших порядков могут быть взяты прямо из формулы (18).

Выполняя интегрирование и располагая члены в порядке возрастания степеней f и g, мы получаем после несколько утомительных вычислений

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathfrak{p}\, (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) = \frac{1}{\pi^2} \sum_{\mu,\nu} \frac{l^{2(\mu+\nu)}}{K^{2(\mu+\nu-2)}} f^{2\mu} g^{2\nu} (-1)^{\mu+1} \times \\ \times \frac{(2\mu + 2\nu - 5)!(2\mu + 2\nu - 3)}{2\mu + 2\nu - 1} \cdot \frac{(2\mu - 1)(2\nu - 1)}{(2\mu)!(2\nu)!}. \tag{19}$$

Из формулы (19) видно, что плотность энергии может быть представлена в виде степенного ряда относительно двух комбинаций $f^2 - g^2$ и $(fg)^2$. Так и должно быть, потому что эта плотность энергии и функция Лагранжа релятивистски инвариантны. Поэтому для общего случая взаимной ориентации напряженностей полей комбинации $f^2 - g^2$ и $(fg)^2$ в формуле (19) можно просто заменить соответствующими инвариантами: $(\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2)$ и $(\mathfrak{f}\mathfrak{g})^2$. Например, члены шестого порядка в функции Лагранжа получаются из ряда (19) в виде

$$\frac{1}{240\pi^2} \frac{l^6}{K^2} \left[12(\mathfrak{f}\mathfrak{g})^2 (\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2) + (\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2)^3 \right]. \tag{20}$$

Ряд (19) (если опустить его первые бесконечные члены) также можно просуммировать. Положив $w = (g + if)l/K$, мы получим добавку к $\bar{L}$:

$$\frac{K^4}{\pi^2} \operatorname{Re} \left\{ \frac{13}{48} w^2 - \frac{13}{288} w^4 + \frac{5}{36} fgiw^2 + \left[-\frac{1}{16} - \frac{w^2}{8} + \frac{w^4}{48} + fgi \left(\frac{1}{4} - \frac{w^2}{12} \right) \right] \times \\ \times \ln (1 - w^2) + (-w^2 + fgi) \frac{1}{6w} \ln \frac{1 + w}{1 - w} \right\}. \tag{21}$$

Этот метод позволяет определить члены второго и четвертого порядка относительно напряженностей поля. Вычитаемые величины в формуле (16) не должны

приводить к появлению добавочных членов второго порядка, так как иначе волновые уравнения изменились бы уже при очень малых полях. Однако правдоподобные значения членов четвертого порядка, вероятно, можно найти, используя только законы сохранения, чего мы здесь делать не будем.

Поучительно провести сравнение результата (19) с соответствующими формулами теории позитронов [13]. В обоих случаях добавки к функции Лагранжа могут быть представлены в форме произведения трех сомножителей: выражения второй степени относительно напряженностей поля, безразмерной константы и разложения в ряд по степеням отношения напряженности поля к некоей характеристической критической напряженности поля. Безразмерная константа, зависящая от универсальных постоянных, в теории позитронов равна $e^2/\hbar c$, в теории Юкавы — l^2K^2, т. е. (с точностью до численных множителей) примерно в 10^4 раз больше, чем в теории позитронов. Критическая напряженность поля в теории позитронов составляет

$$\frac{m^2c^3}{e\hbar} = \frac{l^2}{\hbar c} \cdot \frac{l}{(l^2/mc^2)^2},$$

т. е. 1/137 часть «напряженности поля на границе электрона»; в теории Юкавы она равна K/l. Это значение соответствует, если приравнять массе протона собственную энергию принадлежащего l дипольного поля, приблизительно одной десятой части «напряженности поля на границе протона». При очень больших напряженностях поля третий сомножитель — степенной ряд — возрастает в теории позитронов лишь логарифмически, так что вся добавка к максвелловской функции Лагранжа вследствие множителя $e^2/\hbar c$ остается сравнительно малой при всех встречающихся на опыте напряженностях поля. В теории Юкавы степенной ряд при больших напряженностях поля возрастает как квадрат напряженности поля (умноженный на логарифм); поэтому добавка превышает обычную функцию Лагранжа.

Следовательно, как только напряженность поля превысит значение порядка K/l, нелинейные добавки к волновому уравнению должны существенно изменить его решения, и тогда наступает перемешивание различных частей спектра. Эти вычисления показывают, что в волновом пакете, испущенном при столкновении, всегда наступает перемешивание спектра — аналогично тому, как об этом говорилось в разделе Iб, — поскольку лишь граничная частота $k_{\max}$, в основном определяемая временем столкновения, существенно превосходит значения порядка $\sqrt{K/l}$, что имеет место при всех столкновениях с большой передаваемой энергией. Записав в релятивистски инвариантной форме условие того, что в отделившемся от протона волновом пакете становятся существенными нелинейные члены (20) и (21), мы получим неравенство следующего вида [14] (где $\mathfrak{p}_{\rm I}$, $p_{\rm I}^0$ — импульс и энергия протона до столкновения, $\mathfrak{p}_{\rm II}$, $p_{\rm II}^0$ — импульс и энергия после столкновения):

$$(p_{\rm I}^0 - p_{\rm II}^0)^2(\mathfrak{p}_{\rm I} - \mathfrak{p}_{\rm II})^2 > \varkappa^2 Z,$$

причем в численный множитель Z входит также отношение масс протона и мезона, $g^2/\hbar c$ и отношение «радиуса» протона к l. Конечно, формулы (20) и (21) позволяют делать вывод о перемешивании спектра только для области спектра, расположенной

[13] *Heisenberg W., Euler H.* Zs. Phys., 1936, **98**, 714.

[14] Еще Г. Ватагин (*Wataghin G.* Zs. Phys., 1934, **88**, 92; **92**, 547) пытался сделать формулы квантовой электродинамики сходящимися с помощью правил обрезания аналогичного вида. Однако правильнее, по-видимому, предполагать, что неприменимость формул при большой передаваемой энергии носит принципиальный характер.

ниже частоты K. Ведь для более высоких частот предположения, положенные в основу вычислений этого раздела, уже не оправдываются.

Но даже в том случае, если эффективное сечение взаимного рассеяния мезонов с ростом энергии снова убывает примерно пропорционально $1/k$, как можно предположить на основании экспериментально наблюдаемой большой проникающей способности мезонов высокой энергии[15], то перемешивание спектра должно происходить, вероятно, потому, что в процессах столкновения очень высокой энергии соответственно уменьшается и величина возникающего волнового пакета (вследствие лоренцева сокращения).

Следует подчеркнуть, что вывод о таком перемешивании спектра, т. е. о множественных процессах взрывного характера, будет справедливым лишь в том случае, если нелинейные волновые уравнения можно рассматривать на основе принципа соответствия, как это делалось в работе l. c. и разделе Iб. Существующие теперь формальные методы совсем не обязывают нас делать вывод о возможности такого рассмотрения, поскольку ведь и сама квантовая теория нелинейных волновых уравнений до сих пор еще не создана.

В этой связи важно обратить внимание на то, что принцип соответствия в применении к волновым уравнениям во многих случаях дает совершенно иные результаты, нежели обычная квантовая теория возмущений. Особенно просто это можно показать на примере рассеяния мезона на протоне, т. е. на аналоге Комптона или обычного релеевского рассеяния. Поэтому мы рассмотрим это рассеяние с целью выяснить пределы применимости существующей теории.

в) Рассеяние мезона на протоне

Рассеяние мезона на протоне рассматривалось в нескольких работах[16]. Исследования дали одинаковый результат, что эффективное сечение этого рассеяния — в противоположность эффективному сечению рэлеевского рассеяния — в первом приближении не зависит от массы протона, но сохраняет конечное значение даже в предположении о бесконечно большой массе протона. Поэтому в области частот волн Юкавы $\varkappa \lesssim k$ эффективное сечение становится значительно больше того, что следовало бы ожидать по аналогии с электродинамикой.

Эти результаты означают, что под влиянием волнового поля Юкавы некоторые степени свободы протона должны колебаться безынерционно, или что это предполагается, по крайней мере, при формальном методе рассмотрения. Более детальное рассмотрение показывает, что эффективное сечение не зависит от массы по причине двух процессов: рассеяния поперечных волн в результате взаимодействия, имеющегося в уравнении (12), и рассеяния продольных волн при зависящем от g_1 обменном взаимодействии, которое возникает по аналогии с обычной электродинамикой. В первом случае безынерционной колебательной степенью свободы служит спин, во втором случае — аналогичная спину координата, которая отличает протон от нейтрона. В теории без обменных сил высокое эффективное сечение рассеяния продольных волн не получается.

Теперь мы покажем, что в первом из двух случаев, в котором можно применять уравнение (12), вывод о безынерционном колебательном изменении спиновой координаты основывается, вероятно, на неверном применении теоретических формул, и что применение к уравнению (12) принципа соответствия дает совсем

[15] *Euler H., Heisenberg W.* Ergebn. der exakten Naturwiss., 1938, **17**, 61 и далее. — Русский перевод: с. 528–591.

[16] *Yukawa H., Sakata S.* Proc. Physic. Math. Soc. Japan, 1937, **19**, 1084; *Bhabha H. J.* Proc. Roy. Soc. London, 1938, **A 166**, 501; *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. London, 1938, **A 166**, 529.

другие результаты. Ибо оказывается, что собственное поле протона, которое можно определить из уравнения (12), приводит к значительной инерционности движения спина, настолько значительной, что эффективное сечение рассеяния изменяется полностью.

При этих вычислениях можно применять нерелятивистское приближение; таким образом, мы предполагаем, что масса протона очень велика и что скорость протона очень мала по сравнению с c.

Из уравнения (12) мы образуем функцию Гамильтона

$$\begin{aligned} H &= \int d\mathfrak{r} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mathfrak{u}}_k} \dot{\mathfrak{u}}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_0} \dot{u}_0 + \frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}} \dot{\psi} - L \right) = \\ &= \int d\mathfrak{r} \left[-\mathfrak{f}\dot{\mathfrak{u}} - \frac{1}{2}(\mathfrak{f}^2 - \mathfrak{g}^2) - \frac{\varkappa^2}{2}(u_0^2 - \mathfrak{u}^2) + i\psi^* \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \psi^* \beta \psi K \right]. \end{aligned} \tag{22}$$

Далее из уравнения (12) следует формула, определяющая u_0:

$$(\nabla \mathfrak{f}) + \varkappa^2 u_0 = 0. \tag{23}$$

Из формул (22) и (23) получается

$$H = \int d\mathfrak{r} \left[\frac{1}{2}(\mathfrak{f}^2 + \mathfrak{g}^2) + il\mathfrak{f}_k \psi^* \beta \alpha_k \psi + \frac{\varkappa^2}{2}(u_0^2 + \mathfrak{u}^2) + i\psi^* \alpha_k \frac{\partial \psi}{\partial x_k} - \psi^* \beta \psi K \right]. \tag{24}$$

Поскольку должен существовать только один протон, то вместо волновой функции протона можно взять в качестве переменных его координаты. Тогда получается

$$H = \int d\mathfrak{r} \left[\frac{1}{2}(\mathfrak{f}^2 + \mathfrak{g}^2) + \frac{\varkappa^2}{2}(u_0^2 + \mathfrak{u}^2) + il\mathfrak{f}_k \beta \alpha_k \delta(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}_P) - \alpha_k p_k - \beta K \right]. \tag{25}$$

Теперь мы воспользуемся предположением, что скорость протона всегда мала по сравнению с c. Это означает, что в функции (25) члены с α_k малы по сравнению с членами, содержащими σ_k, и что можно положить $\beta \approx 1$. Тогда для изменения спиновой координаты во времени мы получаем с учетом соотношения $\mathfrak{g} = [\nabla \mathfrak{u}] - l\sigma\delta(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}_P)$ следующие уравнения

$$\dot{\sigma} = i(H\sigma - \sigma H) \approx 2l \int d\mathfrak{r}\, \delta(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}_P) [[\nabla \mathfrak{u}]\sigma]. \tag{26}$$

Для того чтобы перейти от квантовой теории к классической модели, мы заменим вектор спина σ единичным вектором $\mathfrak{s}$; далее, вместо функции $\delta(\mathfrak{r}, \mathfrak{r}_P)$ введем «размытую» δ-функцию $D(\mathfrak{r})$, причем сверх того положим $\mathfrak{r}_P = 0$, так как движение протона сводится в нашем случае только к вращению спина. Замена δ-функции на $D(\mathfrak{r})$ необходима для того, чтобы сделать результаты конечными. Таким образом, в классической модели справедливы уравнения:

$$\dot{\mathfrak{s}} = 2l \int d\mathfrak{r}\, D(\mathfrak{r}) [\mathfrak{g}, \mathfrak{s}]. \tag{27}$$

Далее, из уравнения (12) (в том же приближении, как и выше), при условии $(\nabla \mathfrak{u}) = u_0 = 0$ — что мы предположим, так как будем рассматривать только рассеяние поперечных волн — мы находим

$$\Delta \mathfrak{u} - \ddot{\mathfrak{u}} - \varkappa^2 \mathfrak{u} = -l[\nabla(\mathfrak{s}\, D(\mathfrak{r}))]. \tag{28}$$

Для решения этого уравнения целесообразно ввести вектор Герца по соотношению $\mathfrak{u} = [\nabla \mathfrak{Z}]$; тогда получается

$$\Delta\mathfrak{Z} - \ddot{\mathfrak{Z}} - \varkappa^2\mathfrak{Z} = -l\mathfrak{s}\, D(\mathfrak{r}). \tag{29}$$

Пусть теперь на протоне рассеивается поперечная волна следующей формы

$$\mathfrak{u} = \mathfrak{a}\exp\{i(\mathfrak{f}\mathfrak{r} - k_0\tau)\}, \quad \mathfrak{a} \perp \mathfrak{f}. \tag{30}$$

Применяя теорию возмущений и пренебрегая собственным полем протона (что, конечно, не очень обосновано) мы могли бы рассчитать рассеяние следующим образом. Положим

$$\mathfrak{u} = \mathfrak{u}_0 + \mathfrak{u}_1, \quad \mathfrak{Z} = \mathfrak{Z}_0 + \mathfrak{Z}_1, \quad \mathfrak{s} = \mathfrak{s}_0 + \mathfrak{s}_1,$$

где $\mathfrak{s}_0$ — невозмущенное значение спина, $\mathfrak{u}_0$ и $\mathfrak{Z}_0$ — невозмущенные плоские волны. Из уравнения (27) находим

$$\dot{\mathfrak{s}}_1 \approx 2li\int d\mathfrak{r}\, D\mathfrak{r}\big[[\mathfrak{f}\mathfrak{a}]\mathfrak{s}_0\big]\exp\{i(\mathfrak{f}\mathfrak{r} - k_0\tau)\} \approx 2il\exp\{-ik_0\tau\}\big[[\mathfrak{f}\mathfrak{a}]\mathfrak{s}_0\big],$$

$$\mathfrak{s}_1 \approx -\frac{2l}{k_0}\big[[\mathfrak{f}\mathfrak{a}]\mathfrak{s}_0\big]\exp\{-ik_0\tau\}.$$

Следовательно, из уравнения (29) имеем

$$\mathfrak{Z}_1 = -l\frac{2l}{k_0}\big[[\mathfrak{f}\mathfrak{a}]\mathfrak{s}_0\big]\frac{\exp\{(kr - k_0\tau)\}}{4\pi r}$$

и

$$\mathfrak{u}_1 = -\frac{2il^2}{k_0}\left[\frac{k\mathfrak{r}}{r}\big[[\mathfrak{f}\mathfrak{a}]\mathfrak{s}_0\big]\right]\frac{\exp\{i(kr - k_0\tau)\}}{4\pi r}.$$

В частном случае, когда $\mathfrak{s}_0 \| \mathfrak{a}$, рассеянная волна принимает вид

$$\mathfrak{u}_1 = \frac{2il^2}{k_0}\mathfrak{a}k[\mathfrak{f}\mathfrak{r}]\frac{\exp\{i(kr - k_0\tau)\}}{4\pi r^2},$$

и отсюда для эффективного сечения рассеяния получается

$$Q = \frac{2l^4k^4}{3\pi k_0^2}.$$

Это значение соответствует результатам вычислений, выполненных в цитированной выше работе Баба и Гайтлера с применением квантовой теории возмущений.

Однако в действительности даже покоящийся протон также и в отсутствие волны окружен сильным полем $\mathfrak{g}_0$, т.е. собственным полем. Вектор напряженности этого поля направлен вдоль пространственного протяжения функции $D(\mathfrak{r})$. В предельном случае $D(\mathfrak{r}) \to \delta(\mathfrak{r})$ поле вблизи протона становится бесконечно большим. Можно легко показать, что в случае центрально-симметричной функции $D(\mathfrak{r})$ среднее собственное поле

$$\bar{\mathfrak{g}}_0 = \int \mathfrak{g}_0\, D(\mathfrak{r})\, d\mathfrak{r} \tag{31}$$

направлено параллельно $\mathfrak{s}_0$. Уравнение движения тогда имеет вид

$$\dot{\mathfrak{s}} = 2l[\bar{\mathfrak{g}}\mathfrak{s}]. \tag{32}$$

Следовательно, собственное поле не влияет на движение $\mathfrak{s}$, если оно остается параллельным $\mathfrak{s}$. Правда, в случае переменного во времени $\mathfrak{s}$ собственное поле уже не будет параллельным $\mathfrak{s}$ в точности. Чем быстрее колеблется спиновый момент, тем больше отстает от направления спина собственное поле. Для того, чтобы убедиться в этом, мы снова предположим, что $\mathfrak{a}||\mathfrak{s}_0||$ оси z; $\mathfrak{a} = (0, 0, a)$; $\mathfrak{s}_0 = (0, 0, 1)$. Допустим, что падающая волна распространяется по оси x: $\mathfrak{k} = (k, 0, 0)$.

Попытаемся искать решение в виде

$$\mathfrak{s} = \mathfrak{s}_0 + \mathfrak{s}_1 = \mathfrak{s}_0 + \mathfrak{e} \exp\{-ik_0\tau\}, \tag{33}$$

причем $\mathfrak{e} \perp \mathfrak{s}_0$ и $\mathfrak{e} \ll 1$. Неоднородное уравнение (29) имеет решение

$$\begin{gathered} \mathfrak{Z} = \mathfrak{Z}_0 + \mathfrak{Z}_1; \\ \mathfrak{Z}_0 = \mathfrak{s}_0 l \int \frac{D(\mathfrak{r}') \exp\{-\varkappa|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|\}}{4\pi|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|} d\mathfrak{r}', \\ \mathfrak{Z}_1 = \mathfrak{e} l \exp\{-ik_0\tau\} \int \frac{D(\mathfrak{r}') \exp\{ik|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|\}}{4\pi|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|} d\mathfrak{r}'. \end{gathered} \tag{34}$$

Далее мы введем величину

$$\mathfrak{Z}_1^{(\varkappa)} = \mathfrak{e} l \exp\{ik_0\tau\} \int \frac{D(\mathfrak{r}') \exp\{-\varkappa|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|\}}{4\pi|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|} d\mathfrak{r}'.$$

Величине $\mathfrak{Z}$ соответствует поле $\mathfrak{g} = [\nabla[\nabla\mathfrak{Z}]] - l\mathfrak{s} D(\mathfrak{r})$. Следовательно, имеем

$$\begin{gathered} \bar{\mathfrak{g}}_0 = l \int d\mathfrak{r}\, D(\mathfrak{r}) \left[\nabla \left[\nabla \mathfrak{s}_0 \int \frac{D(\mathfrak{r}) \exp\{-\varkappa|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|\}}{4\pi|\mathfrak{r} - \mathfrak{r}'|} d\mathfrak{r}'\right]\right] - l\mathfrak{s}_0 D(\mathfrak{r}) = \mathfrak{s}_0 g_0(\varkappa), \\ \bar{\mathfrak{g}}_1^{(\varkappa)} = \mathfrak{s}_1 g_0(\varkappa), \quad \bar{\mathfrak{g}}_1 = \mathfrak{s}_1 g_0(-ik). \end{gathered} \tag{35}$$

Вектор $\bar{\mathfrak{g}}_0 + \bar{\mathfrak{g}}_1^{(\varkappa)}$ имеет такое же направление, как $\mathfrak{s}$. Уравнение движения для $\mathfrak{s}$ после добавления к полю (34) еще поля плоской волны (30) $\mathfrak{g}_{пл}$ принимает поэтому вид

$$\dot{\mathfrak{s}} = 2l\left[\mathfrak{g}_{пл} + \bar{\mathfrak{g}}_1 - \bar{\mathfrak{g}}_1^{(\varkappa)}, \mathfrak{s}\right].$$

В этом уравнении можно пренебречь добавкой $\mathfrak{s}_1$ по сравнению с $\mathfrak{s}_0$. Тогда мы получим, наконец, уравнение, определяющее $\mathfrak{e}$:

$$-ik_0\mathfrak{e} = \left[i[\mathfrak{k}\mathfrak{a}] + \mathfrak{e}(g_0(-ik) - g_0(\varkappa)), \mathfrak{s}_0\right]. \tag{36}$$

Решение его имеет вид

$$\mathfrak{e}_x = -\frac{2lkk_0 a}{4l^2(g_0(-ik) - g_0(\varkappa))^2 - k_0^2}, \quad \mathfrak{e}_y = \frac{4il^2 ka(g_0(-ik) - g_0(\varkappa))}{4l^2(g_0(-ik) - g_0(\varkappa))^2 - k_0^2},$$

и поэтому в соответствии с уравнением (35):

$$Q = \frac{2k^4 l^4 \left(k_0^2 + 4l^2|g_0(-ik) - g_0(\varkappa)|^2\right)}{3\pi\left|4l^2(g_0(-ik) - g_0(\varkappa))^2 - k_0^2\right|^2}. \tag{37}$$

При низкой частоте внешнего поля выполняется условие

$$-ik = \sqrt{\varkappa^2 - k_0^2} \sim \varkappa,$$

откуда $l|g_0(-ik) - g_0(\varkappa)| \ll k_0$, и формула для эффективного сечения (37) переходит в формулу, полученную по теории возмущений. Однако при более высоких частотах — а ведь вследствие неравенства $k_0 > \varkappa$ всякая плоская волна относится именно к этой области частот — величина $|g_0(-ik) - g_0(\varkappa)|$ будет больше k_0. Значение $g_0(-ik) - g_0(\varkappa)$ можно вычислить только при более точном определении функции $D(\mathfrak{r})$. Можно, например, определить выбор функции $D(\mathfrak{r})$ условием, что собственная энергия протона, которая получается при заданной функции $D(\mathfrak{r})$ из функции Гамильтона (25), по порядку величины должна соответствовать массе протона. Тогда величину взаимодействия $-l\mathfrak{s}\bar{\mathfrak{g}}$ можно приравнять отрицательной массе протона, откуда следует $g_0(\varkappa) \sim K/l$. Если $\varkappa$ и k малы по сравнению с K, то $g_0(\varkappa)$ можно разложить в ряд по степеням $\varkappa$, после чего получается

$$g_0(-ik) - g_0(\varkappa) = -(ik + \varkappa)\frac{\partial g_0(0)}{\partial \varkappa} - \frac{1}{2}(\varkappa^2 + k^2)\frac{\partial^2 g_0(0)}{\partial \varkappa^2} + \dots .$$

Так как $\frac{\partial g_0(0)}{\partial \varkappa}$ в соответствии с формулами (35) обращается в нуль, то остается

$$g_0(-ik) - g_0(\varkappa) = -\frac{k_0^2}{2}\frac{\partial^2 g_0(0)}{\partial \varkappa^2} + \dots .$$

Производную $\frac{\partial^2 g_0(0)}{\partial \varkappa^2}$ можно оценить, приписав функции $D(\mathfrak{r})$ средний радиус r_0. Тогда среднее поле магнитного диполя с магнитным моментом l: $\bar{g}_0 \sim 1/r_0^3$, и, значит, $1/r_0^3 \sim K/l$; $r_0 \sim \sqrt[3]{l^2/K}$. Поэтому

$$\frac{\partial^2 g_0(0)}{\partial \varkappa^2} \sim \frac{1}{r_0} \sim \sqrt[3]{Kl}.$$

Наконец, для эффективного сечения взаимодействия отсюда получается формула

$$Q \sim \frac{2l^2}{3\pi}\left(\frac{k}{k_0}\right)^4 (Kl)^{-2/3}.$$

Таким образом, эффективное сечение взаимодействия при более высоких частотах оказывается заметно меньше, чем получилось бы при использовании неправильной теории возмущений, и оно обладает тем свойством, что уменьшается с увеличением массы протона, как можно предполагать и из наглядных соображений. Собственное поле протона косвенно вызывает инерцию движения спина, которая до сих пор не учитывалась в квантовотеоретических расчетах. При рассеянии продольного поля Юкавы должна возникать аналогичная ситуация, но этот вопрос далее рассматриваться не будет.

Из формулы (37) можно заключить, что применение обычной квантовой теории возмущений к задаче о рассеянии мезонов на протонах дает абсолютно неверные результаты[17], но что рассмотрение по классической волновой теории на основе принципа соответствия позволяет все же вступить в такую область, в которой теперешняя квантовая механика терпит неудачу. Далее, эффективное сечение рассеяния мезонов на протонах оказывается значительно меньшим, чем предсказывалось до сих пор. Это, по-видимому, неизбежно следует и из опыта. Ибо наблюдаемая большая проникающая способность мезонов не согласуется с приводившимися до сих пор большими значениями эффективного сечения рассеяния.

---

[17] См. по этому вопросу ряд работ, касающихся пределов применимости квантовой теории, например, *March B. A.* Zs. Phys., 1936, **104**, 93 и далее; *Wataghin G.* Op. cit.; а также работу l. c.

III

СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ

а) Эффективные сечения при высоких энергиях

Соображения, приведенные в разделах I и II, можно использовать в первую очередь для того, чтобы поставить вопросы, которые помогли бы целесообразно упорядочивать экспериментальные результаты и которые в случае ответа на них позволили бы надеяться на выяснение теоретических взаимосвязей.

В будущей теории важнейшую роль будут играть, вероятно, такие величины, как полные эффективные сечения в предельном случае высоких энергий. Самой простой величиной этого типа может быть эффективное сечение рождения новых частиц при столкновении. Это эффективное сечение в предельном случае высоких энергий будет стремиться к постоянному предельному значению, если вокруг сталкивающихся частиц нет полей дальнодействующих сил. Если же такие поля дальнодействующих сил существуют, то эффективное сечение может увеличиваться с возрастанием энергии, причем известные примеры подобного рода дают основание полагать, что эффективное сечение будет расти логарифмически. Эту логарифмически растущую часть, непосредственно отражающую влияние дальнодействующих сил, можно будет рассматривать отдельно от постоянного остатка. Постоянный остаток означает нечто вроде того, что в наглядной теории называется «размером» элементарной частицы, и можно также питать надежды на то, что для него, быть может, существуют очень простые закономерности, которые позволяют отчетливо выявить аналогию с образным понятием «размер».

Простейший пример подобных свойств эффективного сечения дает нам рассмотрение столкновения светового кванта с протоном. Эффективное сечение в этом случае при больших энергиях, по-видимому, стремится к постоянному значению порядка 10^{-26} см^2, как показано в работах Нордгейма[18] и Эйлера[19]. Часть эффективного сечения, обусловленная кулоновским полем протона, возрастает с энергией логарифмически и вследствие экранирования протона в атоме водорода остается, очевидно, малой по сравнению с частью сечения, происходящей от других причин. В опубликованных до сих пор работах[20] о рождении мезонов световыми квантами, вероятно, правильно предполагалось, что самым важным первичным процессом здесь должно быть обменное взаимодействие светового кванта со статическим полем Юкавы, существующим вокруг протона. При этом может идти речь о поглощении светового кванта виртуальными частицами Юкавы, т. е. о чем-то вроде фотоэффекта на этих частицах, связанных с протоном, или же — что, может быть, чаще происходит при высоких энергиях — о комптоновском эффекте фотонов на этих частицах. В каждом случае этот процесс в общем связан с внезапным изменением поля Юкавы вблизи протона, и в итоге должен возникать волновой пакет, покидающий протон в форме одновременно испущенных мезонов. Величина и энергия волнового пакета зависит от отдачи, которую испытывает протон.

Вследствие одновременного испускания волнового пакета описанный выше процесс нельзя рассматривать просто как обратный другому процессу, в котором мезон поглощается протоном и при этом испускается фотон. Здесь мы имеем дело с совершенно такой же ситуацией, как при фотоэффекте рентгеновских лучей на атомах; ведь этот эффект также не может быть обратным процессу, в котором

---

[18] *Nordheim L., Frankl J.* Inst., 1938, **226**, 575.

[19] *Euler H.* Zs. Phys., 1937, **105**, 553.

[20] *Heitler W.* Proc. Roy. Soc. London, 1938, **A 166**, 529; *Yukawa H., Sakata S., Kobayasi M., Taketani M.* Proc. Phys. Math. Soc. Japan, 1938, **20**, 720.

быстрый электрон попадает в атом и излучается фотон. Ибо быстрый электрон попадает в атом с заполненными оболочками, так что этот процесс столкновения по величине эффективного сечения не имеет ничего общего с фотоэффектом, при котором вылетающий электрон оставляет атом в возбужденном состоянии. Поэтому вполне возможно, что для столкновения мезона с протоном и одновременного рождения фотона получается совершенно другое эффективное сечение, чем для столкновения протона с фотоном.

Эмпирическое значение 10^{-26} см^2 для эффективного сечения фотон-протон в предельном случае высокой энергии хорошо согласуется с пространственной протяженностью поля Юкавы, окружающего протон. Эффективное сечение столкновения мезон-протон на опыте оказывается существенно меньшим, при высоких энергиях оно может составить, вероятно, лишь сотую часть первого из указанных выше эффективных сечений. В соответствии с соображениями раздела IIв понятно, что простое рассеяние мезона на протоне происходит с малым эффективным сечением. И для эффективного сечения рассеяния мезона на виртуальных частицах Юкавы, окружающих протон, из формулы (20) получаются довольно малые значения при низких энергиях мезона, а при больших энергиях формулы становятся неприменимыми. Более точное вычисление этого небольшого эффективного сечения представляется пока невозможным.

б) Множественные процессы

Поскольку каждое столкновение тяжелых частиц, при котором передается большая энергия, связано также с испусканием волнового пакета мезонов, спектр которого в ходе испускания, вероятно, перемешивается, то столкновения при высокой энергии следует рассматривать всегда с учетом множественных процессов. Множественный процесс определяется спектром волнового пакета после его разрушения, и потому именно спектр мы должны изучать на опыте. В области высоких частот этот спектр должен спадать приблизительно по степенному закону, и потому целесообразно посмотреть, в какой мере экспериментальный материал может быть представлен этим законом. Эйлер[21] показал, что распределение интенсивности по закону

$$J(k_0)\,dk_0 = \frac{a}{k_0}dk_0, \qquad a = \mathrm{const}, \tag{38}$$

в грубых чертах может соответствовать наблюдаемым данным. Мы рассмотрим на этом примере, какие следствия получаются из формулы вида (38). Полная энергия столкновения ε должна быть связана с постоянной a соотношением

$$\varepsilon \approx \int\limits_{\varkappa}^{\varepsilon} J(k_0)\,dk_0 \approx a \ln\frac{\varepsilon}{\varkappa}. \tag{39}$$

Поэтому для среднего числа частиц получится:

$$\overline{n} = \int\limits_{\varkappa}^{\varepsilon} \frac{J(k_0)\,dk_0}{k_0} \approx \frac{\varepsilon}{\varkappa \ln\frac{\varepsilon}{\varkappa}}. \tag{40}$$

Следовательно, среднее число частиц должно возрастать приблизительно пропорционально имеющейся энергии. Средняя энергия испущенной частицы должна

---

[21] *Euler H.* Op. cit.

составлять $\varkappa \ln (\varepsilon/\varkappa)$, т.е. должна быть почти постоянной. Вероятность испускания только одной частицы окажется равной $\overline{n} \exp(-\overline{n})$ и потому будет очень мала. Вероятность того, что одна частица получит больше половины всей имеющейся энергии, в соответствии с формулами (6) и (38) будет равна

$$1 - \exp\left\{-1/\ln\frac{\varepsilon}{\varkappa}\right\} \sim \frac{1}{\ln\frac{\varepsilon}{\varkappa}}.$$

Таким образом, в случае распределения (38) имеется заметная вероятность испускания также одной частицы сравнительно высокой энергии.

Обосновать распределение типа (38) было бы возможно, вероятно, только путем решения нелинейного волнового уравнения — аналогично тому, о чем говорилось в разделе Iб. Пока неизвестно, в какой мере распределение зависит от частной формы нелинейных членов уравнения.

При сравнении результатов теории с опытом, который до сих пор дает еще очень мало материала для суждения о множественных процессах[22], следует также учитывать, что с каждым волновым пакетом мезонов в общем будет связан волновой пакет фотонов. Ведь каждое столкновение с протоном приводит также к внезапному изменению поля. При этом отношение общей энергии фотонов к энергии мезонов составляет $l^2/\hbar c : g^2/\hbar c$, т.е. примерно 1 : 30, даже в том случае, когда в первичном процессе испускается преимущественно фотон. Но и это сравнительно небольшая часть энергии, уносимая электромагнитным полем, может приводить к появлению каскадов, которые образуют как бы множественный процесс и, например, в случае толчков в свинце дают, возможно, почти столько же частиц, сколько и настоящий множественный процесс. Только в легких элементах роль этих каскадов должна уменьшаться. Итак, во многих случаях отличить множественные процессы мезонов от каскадов нелегко. Поэтому важно исследовать на содержание проникающих частиц ливни, особенно большие, наблюдаемые за толстыми слоями легких материалов.

---

[22] См. обзор *Euler H., Heisenberg W.* Ergebn. der exakten Naturwiss., 1938, **17**, **49**. — Русский перевод: с. 528–591.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие 5

Часть I

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

К квантовой теории структуры линий и аномального эффекта Зеемана
Перевод Ю. А. Данилова 8

Интенсивность расщепленных линий и их зеемановских компонент
Совместно с А. Зоммерфельдом
Перевод А. А. Сазыкина 29

К квантовой теории молекул
Совместно с М. Борном
Перевод А. А. Сазыкина 48

Об изменении формальных правил квантовой теории в проблеме аномального эффекта Зеемана
Перевод Ю. А. Данилова 72

О квантовотеоретической интерпретации кинематических и механических соотношений
Перевод А. А. Сазыкина 86

К квантовой механике
М. Борн и П. Иордан
Перевод Ю. А. Данилова 99

К квантовой механике. II
Совместно с М. Борном и П. Иорданом
Перевод Ю. А. Данилова 127

Задача многих тел и резонанс в квантовой механике
Перевод А. А. Сазыкина 176

Задачи многих тел и резонанс в квантовой механике. II
Перевод А. А. Сазыкина 187

О наглядном содержании квантовотеоретической кинематики и механики
Перевод А. А. Сазыкина 209

Применение квантовой механики к проблеме аномального эффекта Зеемана
Совместно с П. Иорданом
Перевод Ю. А. Данилова 229

О спектрах атомных систем с двумя электронами
Перевод А. А. Сазыкина 243

К принципу запрета Паули
Перевод Ю. А. Данилова 259

Границы применимости современной квантовой теории
Перевод Ю. А. Данилова 272

О спектре водорода с точки зрения новой квантовой механики
В. Паули мл.
Перевод А. А. Сазыкина 284

Флуктуационные явления и квантовая механика
Перевод Ю. А. Данилова 306

Часть II

КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ПОЛЯ

«Наблюдаемые величины» в теории элементарных частиц
Перевод Ю. А. Данилова 312

Наблюдаемые величины в теории элементарных частиц. II
Перевод Ю. А. Данилова 334

Наблюдаемые величины в теории элементарных частиц. III
Перевод Ю. А. Данилова 358

О математических основах теории элементарных частиц
Перевод Ю. А. Данилова 373

Часть III

ТЕОРИЯ ФЕРРОМАГНЕТИЗМА

К теории ферромагнетизма
Перевод А. А. Сазыкина 382

К квантовой теории ферромагнетизма
Перевод А. А. Сазыкина 396

К теории магнитострикции и кривой намагничивания
Перевод А. А. Сазыкина 406

Часть IV

ТЕОРИЯ ТУРБУЛЕНТНОСТИ

Абсолютные размеры вихревой дорожки Кармана
Перевод Ю. А. Данилова 416

Об устойчивости ламинарного течения
Перевод Ю. А. Данилова 422

Об устойчивости и турбулентности течений жидкости
Перевод Ю. А. Данилова 426

Замечания по поводу проблемы турбулентности
Перевод Ю. А. Данилова 462

К статистической теории турбулентности
Перевод Ю. А. Данилова 467

К теории статистической и изотропной турбулентности
Перевод Ю. А. Данилова 492

Часть V

ТЕОРИЯ ЯДРА

О строении атомных ядер. I
Перевод А. А. Сазыкина 498

О строении атомных ядер. II
Перевод А. А. Сазыкина 506

О строении атомных ядер. III
Перевод А. А. Сазыкина 513

Часть VI

ТЕОРИЯ КОСМИЧЕСКИХ ЛИВНЕЙ

К теории «ливней» в высотном излучении
Перевод А. А. Сазыкина 522

Теоретические основы объяснения космических лучей
Совместно с Х. Эйлером
Перевод А. А. Сазыкина 528

К теории ливней взрывного типа в космических лучах. II
Перевод А. А. Сазыкина 592

КЛАССИКИ
н а у к и

В. ГЕЙЗЕНБЕРГ



ИЗБРАННЫЕ ТРУДЫ



В. ГЕЙЗЕНБЕРГ ИЗБРАННЫЕ ТРУДЫ

